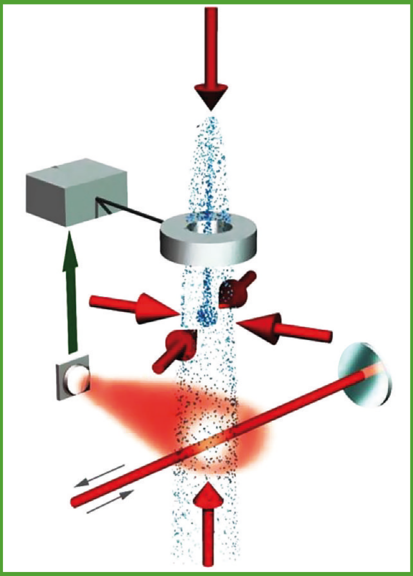
SAVOIRS PHYSIQUE ACTUELS

# PHYSIQUE QUANTIQUE

## APPLICATIONS ET EXERCICES CORRIGÉS – TOME II



MICHEL LE BELLAC

3e ÉDITION

PRÉFACES DE
CLAUDE COHEN-TANNOUDJI
ET DE FRANCK LALOË

CNRS ÉDITIONS

edp sciences

Michel Le Bellac

# Physique quantique

## Tome II : Applications et exercices corrigés

3$^{e}$ édition

S A V O I R S   A C T U E L S

EDP Sciences/CNRS Éditions

*Illustration de couverture : Fontaine atomique. Des atomes froids stockés initialement dans un piège magnéto-optique sont lancés vers le haut et retombent sous l'effet de la gravité : voir la sous-section 15.3.5. Copyright : C. Salomon, Laboratoire Kastler-Brossel, École Normale Supérieure ; A. Clairon, SYRTE, Observatoire de Paris ; CNES, Centre National d'Études Spatiales. Courtoisie de Christophe Salomon.*

Imprimé en France.



**ISBN** EDP Sciences 978-2-7598-0804-5

**ISBN** CNRS Éditions 978-2-271-07604-3

# Table des matières

**Tome I : Fondements**

**Tome II : Applications et exercices corrigés**

# Avant-propos

Ce livre est issu de cours donnés à l'Université de Nice-Sophia Antipolis dans les années 1970/1980 en maîtrise de physique et en DEUG MP deuxième année, et ensuite dans les années 2000 en licence (L3) et en master de physique M1 et M2. Il est divisé en un tome 1 : "Fondements" et un tome 2 : "Applications". Les dix premiers chapitres du premier tome correspondent à un cours standard de mécanique quantique niveau L3, tandis que le chapitre 11 et le deuxième tome sont plutôt du niveau M1 et M2. Le livre contient environ 200 exercices de longueur et de difficulté variées ; plus des trois quarts de ces exercices ont été effectivement utilisés pour des séances de travaux dirigés ou des examens et une sélection de corrigés est disponible à la fin du second tome. En plus des étudiants de licence et de master et ceux des Écoles d'Ingénieurs, ce livre est susceptible d'intéresser un large public de physiciens : étudiants en thèse, chercheurs, enseignants du second degré ou du supérieur qui souhaitent trouver une introduction à la littérature récente ou simplement rafraîchir leurs connaissances en physique quantique.

L'organisation du livre diffère notablement de celle des textes classiques, qui prennent tous comme point de départ l'équation de Schrödinger, ce qui oblige à exposer les principes de base de la mécanique quantique dans un cas qui n'est pas le plus simple et a l'inconvénient de masquer ces principes par des calculs souvent fastidieux. Je me suis efforcé au contraire d'introduire les fondements de la mécanique quantique sur les exemples les plus simples et l'équation de Schrödinger apparaît seulement au chapitre 8. L'approche suivie consiste à mener jusqu'à à son terme la logique qu'avait adoptée Feynman (Feynman *et al.* [1965]) : développer au maximum un traitement algébrique et exploiter les symétries, en présentant la mécanique quantique dans son cadre autonome, sans faire référence à la physique classique. Cette logique a de nombreux avantages.

- L'approche algébrique permet de traiter des problèmes simples dans des espaces de dimension finie, par exemple de dimension deux : polarisation d'un photon, spin 1/2, atome à deux niveaux...

- Elle permet d'énoncer de la façon la plus claire les postulats de la mécanique quantique, en séparant ce qui est fondamental de ce qui ne l'est pas (par exemple le principe de correspondance n'est pas un postulat fondamental).
- L'exploitation des propriétés de symétrie permet l'introduction la plus générale des propriétés physiques fondamentales : impulsion, moment angulaire… comme générateurs infinitésimaux de ces symétries, sans faire appel au principe de correspondance et à un analogue classique.

Les aspects pédagogiques ont fait l'objet d'une attention particulière. La progression des chapitres a été soigneusement étudiée, les chapitres 2 à 5 utilisant uniquement des espaces de dimension finie ; c'est seulement une fois les bases acquises que l'on passe au cas général à partir du chapitre 6. Un effort a été fait sur le vocabulaire, afin d'éviter certaines expressions historiquement datées et qui peuvent être un obstacle à la compréhension de la mécanique quantique : suivant la modernisation du vocabulaire préconisée par Lévy-Leblond [1999], "propriété physique" est utilisé au lieu d'"observable", "inégalité de Heisenberg" au lieu de "principe d'incertitude", des expressions comme "complémentarité" ou "dualité onde-corpuscule" ont été evitées, etc.

Les chapitres clés du livre, c'est-à-dire ceux qui divergent de la façon la plus évidente de l'exposé traditionnel, sont les chapitres 3, 4, 5 et 7. Le chapitre 3 introduit l'espace des états sur l'exemple de la polarisation des photons et montre comment passer d'une amplitude ondulatoire à une amplitude de probabilité. Le spin 1/2 permet ensuite d'initier le lecteur à un problème sans analogue classique et à ses propriétés essentielles : algèbre des matrices de Pauli, matrices de rotation, précession de Larmor. Dans le chapitre 4, la distinction entre le cadre conceptuel général de la mécanique quantique et la modélisation d'un problème concret est soigneusement expliquée. Le chapitre 5 met en pratique la mécanique quantique sur des applications simples et physiquement importantes, dans le cas de systèmes dont le nombre de niveaux est fini. Il introduit l'interaction d'un système à deux niveaux atomique ou moléculaire avec un champ électromagnétique oscillant et développe des applications importantes : RMN, émission et absorption de photons, lasers, horloge atomiques… Le chapitre 7 a comme objectif l'étude des symétries à partir du théorème de Wigner, qui est généralement ignoré des manuels malgré son importance cruciale. La symétrie de rotation permet de définir le moment angulaire comme générateur infinitésimal et de démontrer immédiatement les relations de commutation de $\vec{J}$ en soulignant leur origine géométrique.

Le chapitre 11 sur l'intrication et la non-localité quantiques et les chapitres du deuxième tome pourront servir d'introduction à des sujets importants, et dont beaucoup sont apparus récemment : états intriqués, décohérence, information quantique, états du champ électromagnétique, intégrale de chemin, manipulation d'atomes par laser, condensats de Bose-Einstein, équations pilotes pour les systèmes ouverts et enfin mécanique quantique relativiste (équation de Dirac). Cette nouvelle édition, contrairement à la première qui

était avant tout un livre d'enseignement, couvre une trop grande variété de domaines pour qu'elle puisse encore correspondre à un cours d'une année. Le guide de lecture ci-dessous devrait permettre au lecteur de s'orienter dans le livre pour un cours d'introduction à la mécanique quantique.

## Guide de lecture

Seules les sections 1.3 à 1.5 du chapitre 1 sont indispensables pour la suite, et le chapitre 2 peut être omis par le lecteur qui possède le niveau L2 en algèbre. Les chapitres 3 et 5 constituent, à mon avis, le cœur d'une introduction à la mécanique quantique : les principes de base sont introduits sur les exemples de la polarisation du photon et du spin 1/2, et le rôle de la symétrie de rotation est mis en valeur dans le cas du spin 1/2. Des applications simples de ces principes de base sont exposées dans le chapitre 5 : résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour des problèmes de chimie quantique élémentaire, oscillations de Rabi, le tout illustré par la RMN, l'émission et l'absorption de photons par un atome à deux niveaux, le laser et les horloges atomiques. Le chapitre 4 (Postulats de la mécanique quantique) est un peu plus abstrait : le lecteur pourra se contenter d'une première prise de contact, et y revenir après avoir acquis un peu plus de familiarité avec la mécanique quantique. Dans le chapitre 6, le lecteur peut se limiter à la section 6.3, qui donne les recettes "mathématiques" pour la suite. Les chapitres 7 à 10 sont classiques dans tout cours de mécanique quantique niveau L3. Toutefois la section 7.4 (invariance galiléenne) peut être omise sans dommage pour la suite et la section 8.4 (bandes d'énergie) peut trouver sa place dans un cours de physique du solide. Il en est de même pour la section 10.3 (niveaux de Landau) qui peut aussi faire partie d'un cours de physique du solide. Dans une première lecture du chapitre 11, on peut se limiter à l'introduction de l'opérateur statistique qui sera indispensable pour la suite. Il serait toutefois dommage de ne pas consacrer un peu de temps à la présentation élémentaire des inégalités de Bell (section 11.2). Le lecteur peut aborder les autres sections de ce chapitre, en particulier celle sur l'information quantique, en fonction de ses intérêts. Il en est de même pour les chapitres du tome 2 qui sont indépendants en première approximation ; le lecteur familier du tome 1 peut les aborder dans un ordre indifférent. Le chapitre 12 (Méthodes semi-classiques) est entièrement optionnel, et ses quatre grandes parties : intégrale de chemin, approximation BKW, distribution de Wigner et phases géométriques sont largement indépendantes. Dans une première lecture, il est possible de se limiter aux sections 14.1 et 14.2 du chapitre 14 (Particules identiques). Enfin les sections 15.1 et 15.2 sont une introduction standard à la physique atomique, les autres sections de ce chapitre étant optionnelles.

**Remerciements.** J'ai bénéficié des critiques et suggestions de Pascal Baldi, Jean-Pierre Farges, Yves Gabellini, Thierry Grandou, Jacques Joffrin, Jean-Marc Lévy-Leblond, Christian Miniatura et tout particulièrement de Michel Brune, Jean Dalibard, Franck Laloë, Fabrice Mortessagne, Jean-Pierre

Romagnan, François Rocca et Sébastien Tanzilli qui ont lu de larges extraits du manuscrit. Je remercie également David Wilkowski qui a inspiré le texte de plusieurs exercices du chapitre 15. Je suis bien entendu entièrement responsable du texte final. L'aide de Karim Bernardet et de Fabrice Mortessagne a été décisive dans la réalisation des figures, et je tiens à remercier Christian Taggiasco pour sa compétence et sa disponibilité dans l'installation et la maintenance de l'ensemble des logiciels nécessaires. Enfin ce livre n'aurait pas vu le jour sans les encouragements et le soutien sans faille de Michèle Leduc, et je suis très reconnaissant à Claude Cohen-Tannoudji et Franck Laloë qui ont bien voulu le préfacer.

N.B. Cet ouvrage utilise le point décimal.

# Chapitre 12

# Méthodes semi-classiques

Il arrive souvent en physique qu'une théorie (ou un modèle) $\mathcal{S}$ soit la limite d'une théorie (ou un modèle) plus complexe $\mathcal{C}$, lorsqu'un paramètre sans dimension $\delta$ tend vers zéro : $\lim_{\delta\to 0}\mathcal{C} = \mathcal{S}$. L'exemple emblématique d'une telle limite est la limite non relativiste (NR), ou galiléenne, de la mécanique relativiste (R). Le petit paramètre est alors le rapport d'une vitesse caractéristique $v$ du problème à la vitesse de la lumière : $\delta = v/c$, et R$\Longrightarrow$NR si $v/c \to 0$. L'exemple de l'énergie cinétique $K$ illustre cette limite

$$K = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - mc^2 = \frac{1}{2}\,mv^2\left[1 + O\left(\frac{v}{c}\right)^2\right]$$

Cependant, ce cas simple n'est pas générique : le plus souvent la limite $\mathcal{C} \Longrightarrow \mathcal{S}$ est singulière lorsque $\delta \to 0$. Un exemple important est donné par l'hydrodynamique : si $\delta$ est l'inverse du nombre de Reynolds, la limite $\delta \to 0$ de l'équation de Navier-Stokes est l'équation d'Euler des fluides non visqueux. Mais cette limite, qui est encore loin d'être bien comprise, passe par la phase du régime turbulent. Alors que l'on s'attendrait à ce que la dissipation disparaisse progressivement lorsque la viscosité s'annule, elle se concentre dans des régions de plus en plus irrégulières et qui deviennent fractales lorsque $\delta \to 0$.

Une autre limite, qui elle aussi est loin d'être bien comprise et qui nous intéresse particulièrement dans ce chapitre, est la limite classique de la mécanique quantique. Si $S_{\text{car}}$ est une action caractéristique du problème physique considéré, par exemple $S_{\text{car}} = m\omega a^2$ pour un mouvement circulaire de rayon $a$ et de fréquence $\omega$, on pourrait espérer que les effets quantiques deviennent négligeables lorsque le paramètre sans dimension[1] $\delta = \hbar/S_{\text{car}} \ll 1$. Cependant, cette limite se heurte à deux difficultés (au moins !). La première difficulté est qu'il existe une différence conceptuelle fondamentale entre

1. Ce que l'on exprime souvent de façon cavalière comme : la limite $\hbar \to 0$ de la physique quantique est la physique classique. Bien sûr, un tel énoncé est formellement incorrect, car $\hbar$ est dimensionné, ce qui ne nous empêchera pas d'utiliser cette formulation !

les descriptions classique et quantique de la réalité physique[2], et la limite $\hbar/S_{\text{car}} \to 0$ n'a pas de signification évidente. Ainsi que nous l'avons expliqué, on ne peut pas, par exemple, attribuer une trajectoire à une particule quantique, alors que cette notion est essentielle dans la description classique. La limite quantique $\Longrightarrow$ classique ne peut pas se résumer à faire tendre un petit paramètre vers zéro. Au contraire, la limite $v/c \to 0$ de la mécanique relativiste ne pose pas problème parce que la description de la réalité physique est la même dans les deux cas : dans les deux cas, les particules possèdent des positions et des vitesses bien déterminées simultanément et des trajectoires[3]. La mécanique classique a été établie pour le mouvement d'objets macroscopiques que l'on suppose souvent isolés, mais dans une description quantique, ainsi que nous l'avons vu au chapitre 11 section 11.4, on ne peut pas négliger l'interaction d'un objet macroscopique avec son environnement. Le mouvement de cet objet nous *apparaît* classique, avec une trajectoire déterminée, mais le caractère macroscopique de l'objet ne suffit pas en soi à assurer l'existence d'une description classique, où l'on n'observe pas de superpositions linéaires d'états macroscopiquement distincts.

La deuxième difficulté vient de ce que la limite $\hbar \to 0$ est singulière. À titre d'exemple, considérons une expérience de fentes d'Young réalisée avec des particules quantiques à la limite $\hbar \to 0$. L'intensité sur l'écran est

$$I(x) \propto \cos^2 \frac{px}{\hbar}$$

Il existe au moins deux raisons pour lesquelles les franges d'interférences vont disparaître en pratique.

(i) L'interaction avec l'environnement va rendre incohérents les paquets d'ondes issus des deux fentes (voir le § 17.3.5 pour une étude détaillée).

(ii) Les franges d'interférences sont de plus en plus resserrées quand $\hbar \to 0$, les autres quantités étant maintenues fixes, et l'interfrange devient plus petite que la résolution du détecteur.

Dans les deux cas, on observera le résultat classique de l'addition des intensités, et non des amplitudes. La présence de $1/\hbar$ dans l'expression de $I(x)$ est un exemple du caractère singulier de la limite $\hbar \to 0$. Une des conséquences les plus frappantes concerne le chaos : en physique quantique, un système fini ne peut avoir que des fréquences de Bohr discrètes, et le mouvement est quasi-périodique, même si son analogue classique (dont le hamiltonien est formellement identique) est chaotique. La raison en est que les limites $t \to \infty$ et $\hbar \to 0$ ne commutent pas. Si le système est macroscopique, l'interaction avec l'environnement détruit les délicates relations de phase assurant la quasi-périodicité de la dynamique quantique, et le mouvement *apparaît* chaotique

2. L'auteur ne souhaite en aucun cas imposer au lecteur le point de vue philosophique d'une "réalité externe" indépendante. "Réalité physique" est ici une expression commode pour désigner un concept utilisé spontanément par les physiciens.

3. La limite non relativiste de la mécanique est simple, mais il n'en va pas de même pour la limite non relativiste de l'électromagnétisme, qui n'a rien d'évident si l'on veut respecter l'invariance galiléenne, voir Le Bellac et Lévy-Leblond [1973].

si le hamiltonien classique est de type chaotique. Un exemple standard est celui du mouvement de rotation chaotique du satellite de Saturne, Hypérion (Zurek [2003]), qui apparaît classique en raison, en particulier, de son interaction avec le rayonnement solaire.

Dans ce chapitre, nous allons négliger l'environnement en supposant les sytèmes parfaitement isolés, et étudier dans ce cadre la limite $\hbar \to 0$. En fait, dans cette optique, la question centrale est la suivante : quelle est l'empreinte laissée sur le problème quantique, et en particulier sur son spectre de niveaux, par les propriétés du problème classique associé ? La réponse à cette question complexe constitue toujours aujourd'hui un domaine de recherches très actif. Un des problèmes est de comprendre les relations entre les propriétés chaotiques d'un mouvement classique et le spectre de niveaux du problème quantique correspondant. Nous n'aborderons pas ce sujet en raison de sa trop grande technicité ; nous renvoyons le lecteur aux livres cités dans la bibliographie, et nous nous limiterons à des sujets plus élémentaires.

Ce chapitre a pour objectif de montrer que l'on peut recourir dans certains cas à des concepts classiques comme celui de trajectoire ou d'espace de phase pour obtenir des résultats approchés à la limite $\hbar \to 0$ : les méthodes d'approximation correspondantes sont appelées *semi-classiques*. Les trois premières sections sont consacrées à l'intégrale de Feynman, ou intégrale de chemin et à quelques unes de ses applications. L'intégrale de Feynman permet d'écrire des amplitudes de probabilité comme une somme sur des trajectoires, ou chemins. *Cette formulation est exacte*[4], *équivalente au formalisme de l'espace de Hilbert*. C'est une formulation alternative de la mécanique quantique, qui n'introduit que des fonctions à valeurs numériques et se passe complètement des opérateurs. L'intégrale de chemin présente un intérêt considérable pour traiter de problèmes formels : théorie des perturbations, relations entre mécanique quantique et mécanique statistique, théorie quantique des champs. . ., mais elle est peu performante pour la résolution de problèmes concrets standard comme le calcul du spectre de l'oscillateur harmonique ou de l'atome d'hydrogène. En revanche, elle est d'un grand intérêt comme point de départ d'une série d'approximations semi-classiques fondées sur l'approximation de la phase stationnaire. Toutefois, les calculs correspondants sont complexes, et les méthodes semi-classiques fondées sur l'intégrale de chemin sortent du cadre de ce livre ; nous renvoyons donc le lecteur aux références données en fin de chapitre.

La section 12.4 est consacrée à une méthode datant des débuts de la mécanique quantique, la méthode BKW. Elle permet, entre autres, de donner une expression approchée des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde des états liés dans un puits de potentiel et de calculer la probabilité de transmission à travers une barrière de potentiel. Dans la section 12.5, nous nous plaçons dans l'espace de phase $(q, p)$ de la mécanique analytique. L'objectif est d'essayer de définir une densité de probabilité dans l'espace de phase qui soit la plus proche

4. Dans la limite de nos connaissances actuelles !

possible de celle de la mécanique statistique classique. Nous verrons qu'un tel objectif n'est pas facile à atteindre, mais qu'une pseudo-densité de probabilité due à Wigner présente néanmoins des caractéristiques intéressantes. Le lien de la section 12.6 : théorème adiabatique et phases géométriques, avec les sections précédentes est assez ténu. Toutefois, ce lien sera fait grâce à l'effet Aharonov-Bohm.

# 12.1 Propagateurs et fonctions de Green

## 12.1.1 Propagateur de l'équation de Schrödinger

Notre objectif est de décrire l'évolution au cours du temps d'un système quantique de $N$ particules dont la fonction d'onde est connue au temps $t'$. Soit $U(t,t')$ l'opérateur d'évolution (4.14) de ce système, qui vérifie l'équation différentielle (4.17)

$$\big[\mathrm{i}\hbar\partial_t - H(t)\big]U(t,t') = 0 \tag{12.1}$$

et $\varphi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_N;t) \equiv \langle\vec{r}|\varphi(t)\rangle = \varphi(\vec{r},t)$ sa fonction d'onde. On peut l'écrire en terme de la fonction d'onde au temps $t'$, $\varphi(\vec{r},t')$, grâce à la relation de fermeture $\int \mathrm{d}^3r'|\vec{r}\,'\rangle\langle\vec{r}\,'\,| = I$

$$\langle\vec{r}\,|\varphi(t)\rangle = \int \mathrm{d}^3r'\,\langle\vec{r}\,|U(t,t')|\vec{r}\,'\rangle\langle\vec{r}\,'\,|\varphi(t')\rangle = \int \mathrm{d}^3r'\,\langle\vec{r}\,|U(t,t')|\vec{r}\,'\rangle\,\varphi(\vec{r}\,',t') \tag{12.2}$$

avec $\mathrm{d}^3r = \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\ldots\mathrm{d}^3r_N$. L'équation (12.2) met en évidence le *propagateur* $K(\vec{r},t|\vec{r}\,',t')$

$$\boxed{K(\vec{r},t|\vec{r}\,',t') := \langle\vec{r}\,|U(t,t')|\vec{r}\,'\rangle\,\theta(t-t')} \tag{12.3}$$

La fonction de Heaviside $\theta(t-t')$ ($\theta(t)=0$ si $t<0$, $\theta(t)=1$ si $t>0$) assure que la propagation se fait uniquement vers le futur, alors que l'ordre des temps $t$ et $t'$ est quelconque dans $U(t,t')$ : l'équation (12.3) définit le *propagateur retardé*, mais il existe d'autres types de propagateur, qui sont étudiés dans l'exercice 12.7.4. La propriété $U(t,t)=I$ implique la condition aux limites suivante pour $K$

$$\lim_{t\to t'^+} K(\vec{r},t|\vec{r}\,',t') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \tag{12.4}$$

La définition (12.3) montre que le propagateur est l'amplitude de probabilité pour trouver le système au point $\vec{r}$ au temps $t$ sachant qu'il était en $\vec{r}\,'$ au temps $t'$. Ceci rappelle la définition d'une probabilité conditionnelle (voir § 12.2.1), d'où le choix de la notation $K(\bullet|\bullet)$ : le propagateur est une sorte d'amplitude de probabilité de présence conditionnelle. Lorsque $H$ est indépendant du temps, $U(t,t')=\exp[-\mathrm{i}H(t-t')/\hbar]$, et définissant $|\vec{r},t\rangle$ et $|\vec{r}\,',t'\rangle$ par

$$|\vec{r},t\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}\,|\vec{r}\rangle \qquad |\vec{r}\,',t'\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht'/\hbar}\,|\vec{r}\,'\rangle$$

le propagateur $K$ s'écrit aussi

$$K(\vec{r},t|\vec{r}\,',t') \equiv \langle\vec{r},t|\vec{r}\,',t'\rangle\theta(t-t') \tag{12.5}$$

Cette notation est fréquemment utilisée de façon conventionnelle même lorsque $H$ dépend du temps.

Compte tenu de la définition (12.3) et de l'identité

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\theta(t-t') = \delta(t-t')$$

on peut calculer la dérivée par rapport au temps de $K$

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t K = HK + \mathrm{i}\hbar\,\langle\vec{r}\,|U(t,t')|\vec{r}\,'\rangle\,\delta(t-t')$$

Comme $U(t,t) = I$, on en déduit que le propagateur $K$ vérifie l'équation différentielle inhomogène

$$[\mathrm{i}\hbar\partial_t - H(t)]K(\vec{r},t|\vec{r}\,',t') = \mathrm{i}\hbar\,\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\,\delta(t-t') \tag{12.6}$$

où $H(t)$ est écrit en représentation $\vec{r}$. Cette équation ne spécifie pas le propagateur de façon unique, puisque l'on peut toujours ajouter à une solution de (12.6) une solution de l'équation homogène correspondante. Ainsi que nous l'avons déjà noté, c'est la fonction $\theta(t-t')$ dans (12.3) qui fixe la solution de façon unique et définit le propagateur retardé.

Utilisant la propriété de groupe (4.15) de l'opérateur d'évolution et la relation de fermeture $\int \mathrm{d}^3r_1|\vec{r}_1\rangle\langle\vec{r}_1| = I$ écrite pour un temps $t' < t_1 < t$, on déduit l'équation suivante, qui est l'analogue de l'équation de Chapman-Kolmogorov (12.28) valable pour les probabilités conditionnelles des processus markoviens

$$K(\vec{r},t|\vec{r}\,',t') = \int \mathrm{d}^3r_1\,K(\vec{r},t|\vec{r}_1,t_1)K(\vec{r}_1,t_1|\vec{r}\,',t') \tag{12.7}$$

### 12.1.2 Fonctions de Green

Nous allons maintenant nous restreindre au cas où le hamiltonien est indépendant du temps et où l'opérateur d'évolution dépend seulement de la différence $(t-t')$

$$U(t,t') = \exp\big[-\mathrm{i}H(t-t')/\hbar\big]$$

Il sera commode de choisir $t' = 0$ et de récrire le propagateur sous la forme

$$K(\vec{r},t|\vec{r}\,',t'=0) = K(\vec{r},\vec{r}\,';t) = \langle\vec{r}\,|\exp[-\mathrm{i}Ht/\hbar]|\vec{r}\,'\rangle \tag{12.8}$$

Soit $\{\varphi_{ns}(\vec{r}) = \langle\vec{r}\,|\varphi_{ns}\rangle\}$ un système complet de fonctions propres du hamiltonien $H$ d'énergie $E_n$

$$H\varphi_{ns}(\vec{r}) = E_n\varphi_{ns}(\vec{r}) \tag{12.9}$$

où $s$ est un indice de dégénerescence éventuelle des niveaux d'énergie. Compte tenu de ces définitions, on peut récrire le propagateur en utilisant la relation de fermeture des vecteurs propres de $H$, $\sum_{n,s} |\varphi_{ns}\rangle\langle\varphi_{ns}| = I$

$$\begin{aligned} K(\vec{r},\vec{r}\,';t) &= \theta(t)\sum_{n,s}\sum_{m,u}\langle\vec{r}\,|\varphi_{ns}\rangle\langle\varphi_{ns}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}|\varphi_{mu}\rangle\langle\varphi_{mu}|\vec{r}\,'\rangle \\ &= \theta(t)\sum_{ns}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\,\varphi_{ns}(\vec{r})\varphi^*_{ns}(\vec{r}\,') \end{aligned} \tag{12.10}$$

La transformée de Fourier temporelle de (12.10) introduit une fonction intéressante, la *fonction de Green* $G(\vec{r},\vec{r}\,';E)$. Pour calculer cette transformée de Fourier, évaluons l'intégrale

$$I(E) = \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar}\,\theta(t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} = \int_0^{\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E-E_n)t/\hbar}$$

L'intégrand oscille à l'infini, et pour rendre l'intégrale convergente, nous remplaçons $E$ par $E+\mathrm{i}\eta$, $\eta\to 0^+$. Ceci équivaut à prendre la transformée de Fourier d'une fonction $\theta(t)$ comme celle d'une distribution. Nous obtenons pour $I(E)$

$$I(E) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{E-E_n+\mathrm{i}\eta}$$

On vérifie aisément le résultat en calculant la transformée de Fourier inverse à l'aide d'une intégration dans le plan complexe en $E$, ce qui sera fait au § 13.5.1. Nous pouvons maintenant écrire la transformée de Fourier du propagateur

$$G(\vec{r},\vec{r}\,';E) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar}\,K(\vec{r},\vec{r}\,';t) = \sum_{n,s}\frac{\varphi_{ns}(\vec{r})\varphi^*_{ns}(\vec{r}\,')}{E-E_n+\mathrm{i}\eta} \tag{12.11}$$

où le facteur $-\mathrm{i}/\hbar$ a été introduit par convention. La transformation de Fourier inverse est

$$K(\vec{r},\vec{r}\,';t) = \mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}E}{2\pi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\,G(\vec{r},\vec{r}\,';E) \tag{12.12}$$

La fonction $G(\vec{r},\vec{r}\,';E)$ est appelée *fonction de Green* de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, car elle vérifie

$$(E-H)G(\vec{r},\vec{r}\,';E) = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \tag{12.13}$$

qui n'est autre que la transformée de Fourier temporelle de (12.6). Pour justifier directement (12.13), on utilise (12.11)

$$G(\vec{r},\vec{r}\,';E) = \sum_{n,s}\langle\vec{r}\,|\varphi_{ns}\rangle\frac{1}{E-E_n+\mathrm{i}\eta}\langle\varphi_{ns}|\vec{r}\,'\rangle = \langle\vec{r}\,|\frac{1}{E-H+\mathrm{i}\eta}|\vec{r}\,'\rangle$$

ce qui montre que $G(\vec{r},\vec{r}\,';E)$ est l'élément de matrice $\langle\vec{r}\,|G(E)|\vec{r}\,'\rangle$ de l'opérateur $G(E)$

$$G(E) = \frac{1}{E-H+\mathrm{i}\eta} \tag{12.14}$$

et à l'évidence $(E - H)G(E) = I$. Il est parfois commode de considérer des valeurs complexes $z$ de l'énergie, et $G(z) = (z - H)^{-1}$ est la résolvante (voir (2.46)) de $H$, la fonction de Green $G(E)$ étant obtenue en choisissant $z = E + \mathrm{i}\eta$. La résolvante $G(z)$ a des pôles pour les valeurs propres $z = E_n$ du spectre discret de $H$, et le résidu $R_n$ du pôle à $z = E_n$ est relié aux fonctions propres de la valeur propre $E_n$

$$R_n = \sum_s \varphi_{ns}(\vec{r})\varphi^*_{ns}(\vec{r}\,') \tag{12.15}$$

Dans le cas du spectre continu, $G(z)$ est singulier si $z$ appartient au spectre de $H$ et $G(z)$ présente une coupure sur l'axe réel. La connaissance de la fonction de Green pour un problème quantique indépendant du temps est équivalente à celle des fonctions propres et valeurs propres de $H$, c'est-à-dire à la solution complète du problème quantique. C'est cette observation qui rend la fonction de Green particulièrement utile.

### 12.1.3 Propagateur libre

L'exemple le plus simple de propagateur est celui de l'équation de Schrödinger libre : $V = 0$. Pour des raisons de simplicité d'écriture, nous allons nous limiter au cas d'une particule de masse $m$ se déplaçant dans un espace à une dimension, mais la plupart des résultats qui vont suivre se généralisent sans difficulté à $N$ particules dans un espace à trois dimensions. En notant $K_0(x, x'; t)$ le propagateur libre, nous obtenons à partir de (12.8), avec $H = H_0 = P^2/2m$

$$\begin{aligned} K_0(x, x'; t) &= \langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}P^2t/(2m\hbar)}|x'\rangle = \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-x')/\hbar}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2t/(2m\hbar)} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(x-x')^2}{2\hbar t}\right]\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p'\,\exp\left[-\frac{\mathrm{i}tp'^2}{2m\hbar}\right] \end{aligned}$$

où nous avons introduit un système complet d'états de l'opérateur impulsion $P$ pour obtenir la seconde équation de la première ligne, et le changement de variables $p' = p - m(x - x')/t$ pour la seconde ligne. L'intégrale de la seconde ligne se ramène à l'intégrale gaussienne

$$I(a) = \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}u\,\mathrm{e}^{-au^2/2} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \tag{12.16}$$

lorsque $a$ est réel et strictement positif. Pour $a$ complexe, $a = |a|\exp(\mathrm{i}\theta)$, on utilise un prolongement analytique

$$I(a) = \sqrt{\frac{2\pi}{a}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta/2}$$

ce qui donne l'expression explicite de $K_0$

$$\boxed{K_0(x,x';t) = \theta(t)\sqrt{\frac{m}{2\mathrm{i}\pi\hbar t}}\,\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(x-x')^2}{2\hbar t}\right]} \tag{12.17}$$

Comme le propagateur libre ne dépend que de la différence $(x - x')$, il sera commode de choisir par la suite $x' = 0$. La transformée de Fourier temporelle $\overline{G}_0(x;E)$ de $K_0(x;t)$ vérifie d'après (12.13)

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\overline{G}_0(x;E) = \frac{2m}{\hbar^2}\delta(x)$$

Au lieu de $\overline{G}_0$, il est plus commode d'utiliser la fonction de Green $G_0(x;k) = (\hbar^2/2m)\overline{G}_0(x;E)$, avec $E = \hbar^2k^2/2m$, qui vérifie

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + k^2\right)G_0(x,k) = \delta(x) \tag{12.18}$$

Une solution possible de cette équation est

$$G_0(x;k) = \frac{1}{2\mathrm{i}k}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x|} \tag{12.19}$$

En effet,

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x|}\right] &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\mathrm{i}k\epsilon(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x|}\right]\\ &= 2\mathrm{i}k\delta(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x|} - k^2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x|}\end{aligned}$$

où $\epsilon(x) = \theta(x) - \theta(-x)$ est la fonction signe de $x$. La généralisation de (12.18) à trois dimensions

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(\vec{r};\vec{k}) = \delta(\vec{r}) \tag{12.20}$$

sera étudiée dans le chapitre suivant.

## 12.2 L'intégrale de Feynman-Kač

### 12.2.1 Mouvement brownien et diffusion

Dans la section précédente, nous avons vu apparaître des intégrands qui oscillent à l'infini. Ces oscillations constituent un sérieux handicap pour un traitement mathématiquement rigoureux de l'intégrale de chemin que nous allons introduire ci-dessous en exploitant une correspondance remarquable entre problèmes de physique quantique et problèmes de physique statistique. En plus de son utilité dans la discussion de l'intégrale de chemin, cette correspondance peut aussi servir à la compréhension qualitative et même à la

résolution quantitative, en particulier numérique de certains problèmes. Partons de l'équation de Schrödinger pour la particule libre à une dimension

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\varphi(x,t)=0 \tag{12.21}$$

et effectuons la transformation (passage au *temps imaginaire* ou *temps euclidien*)[5] $t\to -\mathrm{i}\tau$

$$\left(\hbar\frac{\partial}{\partial \tau}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\varphi(x,\tau)=0$$

Cette équation a la forme d'une équation de diffusion (parce que l'on a choisi $t\to -\mathrm{i}\tau$ et non $t\to +\mathrm{i}\tau$ !)

$$\frac{\partial\varphi}{\partial\tau}=D\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} \tag{12.22}$$

où l'on identifie $\hbar/2m$ à un coefficient de diffusion $D$. Par une transformation de Fourier spatiale, cette équation devient

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\tilde\varphi(k,\tau)=-Dk^2\tilde\varphi(k,\tau) \tag{12.23}$$

qui a pour solution évidente

$$\tilde\varphi(k,\tau)=C\,\mathrm{e}^{-Dk^2\tau} \tag{12.24}$$

où $C$ est une constante arbitraire. Revenant à l'espace des $x$, on en déduit par une transformée de Fourier de gaussienne

$$\varphi(x,\tau)=\int\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\,\mathrm{e}^{-Dk^2\tau}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}=\frac{\theta(\tau)}{\sqrt{4\pi D\tau}}\exp\left(-\frac{x^2}{4D\tau}\right) \tag{12.25}$$

La constante $C$ de (12.24) a été fixée à un, de sorte que

$$\lim_{\tau\to 0^+}\varphi(x,\tau)=\delta(x) \tag{12.26}$$

L'interprétation physique de $\varphi(x,\tau)$ est la suivante : si une particule (classique !) diffuse à partir de l'origine au temps $\tau=0$, elle sera au point $x$ au temps $\tau$ avec une probabilité $\varphi(x,\tau)$. Plus généralement, on peut définir la *probabilité conditionnelle*

$$\mathsf{p}(x_b,\tau_b|x_a\tau_a)=\frac{1}{\sqrt{4\pi D|\tau_b-\tau_a|}}\exp\left(-\frac{|x_b-x_a|^2}{4D|\tau_b-\tau_a|}\right)\qquad \tau_b>\tau_a \tag{12.27}$$

5. La terminologie “temps euclidien” vient de la théorie quantique des champs. La métrique de Minkowski $x_M^2=x_0^2-\vec r^{\,2}$, avec $x_0=ct$, se transforme au signe près dans la métrique euclidienne $x_E^2=\vec r^{\,2}+x_4^2$ avec $x_4=c\tau$. Le passage au temps euclidien est aussi très utile dans la discussion de l'équation de Fokker-Planck, qui peut se ramener à une équation de Schrödinger en temps imaginaire : voir par exemple Parisi [1989], chapitre 19, ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 9. On trouvera dans le livre de Parisi [1989], chapitre 13, une excellente discussion du prolongement analytique du temps réel au temps imaginaire qui est aussi appelé rotation de Wick.

C'est la probabilité de trouver la particule en $x_b$ au temps $\tau_b$ sachant qu'elle est partie de $x_a$ au temps $\tau_a$. Le *processus* de diffusion étant *markovien*, cette probabilité obéit à une *équation de Chapman-Kolmogorov*

$$\mathsf{p}(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) = \int \mathrm{d}x_1 \mathsf{p}(x_b, \tau_b | x_1, \tau_1) \mathsf{p}(x_1, \tau_1 | x_a \tau_a) \tag{12.28}$$

Pour prouver directement (12.28), on remarque que la transformée de Fourier spatiale de $\mathsf{p}$ est donnée par

$$\tilde{\mathsf{p}}(k, \tau_b - \tau_a) = \mathrm{e}^{-Dk^2(\tau_b - \tau_a)}\, \theta(\tau_b - \tau_a)$$

et que le produit dans l'espace des $k$ se transforme en convolution dans l'espace des $x$. Nous allons maintenant itérer l'équation (12.28) en divisant l'intervalle $[\tau_a, \tau_b]$ en $n$ intervalles de longueur $\varepsilon = (\tau_b - \tau_a)/n$. Aux temps intermédiaires $\tau_j = \tau_a + j\varepsilon$ correspondent des positions $x(\tau_j) = x_j$, $j = 1, 2, \ldots, n-1$, les positions initiale et finale étant $x_0 = x(\tau_a) = x_a$, $x_n = x(\tau_b) = x_b$ (figure 12.1). L'itération de (12.28) donne

$$\begin{aligned}\mathsf{p}(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) &= \int \prod_{j=1}^{n-1} \mathrm{d}x_j\, \mathsf{p}(x_b, \tau_b | x_{n-1}, \tau_{n-1}) \ldots \mathsf{p}(x_{j+1}, \tau_{j+1} | x_j, \tau_j) \ldots \\ &\quad \mathsf{p}(x_1, \tau_1 | x_a, \tau_a) \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi D\varepsilon}} \int \prod_{j=1}^{n-1} \frac{\mathrm{d}x_j}{\sqrt{4\pi D\varepsilon}} \exp\left[-\frac{1}{4D} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\varepsilon}\right]\end{aligned} \tag{12.29}$$

On peut donner une interprétation intuitive de cette formule rigoureuse à la limite $\varepsilon \to 0$ : dans cette limite, la trajectoire en zig-zag de la figure 12.1 représente un “chemin” $x(\tau)$ allant de $(x_a, \tau_a)$ à $(x_b, \tau_b)$ en passant par les points intermédiaires $(\tau_j, x_j)$. Ce chemin est affecté d'un poids statistique

$$\exp\left[-\frac{\varepsilon}{4D} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\varepsilon^2}\right] \to \exp\left[-\frac{1}{4D} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 \mathrm{d}\tau\right]$$

si l'on admet avec un certain optimisme (*cf.* le § 12.3.2) que l'on peut remplacer la somme de Riemann par une intégrale à la limite $\varepsilon \to 0$. On écrit formellement cette somme sur les chemins

$$\frac{1}{\sqrt{4\pi D\varepsilon}} \int \prod_{j=1}^{n-1} \frac{\mathrm{d}x_j}{\sqrt{4\pi D\varepsilon}} \to \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}x(\tau) \tag{12.30}$$

et (12.29) devient avec cette notation

$$\mathsf{p}(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) = \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}x(\tau) \exp\left[-\frac{1}{4D} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 \mathrm{d}\tau\right] \tag{12.31}$$

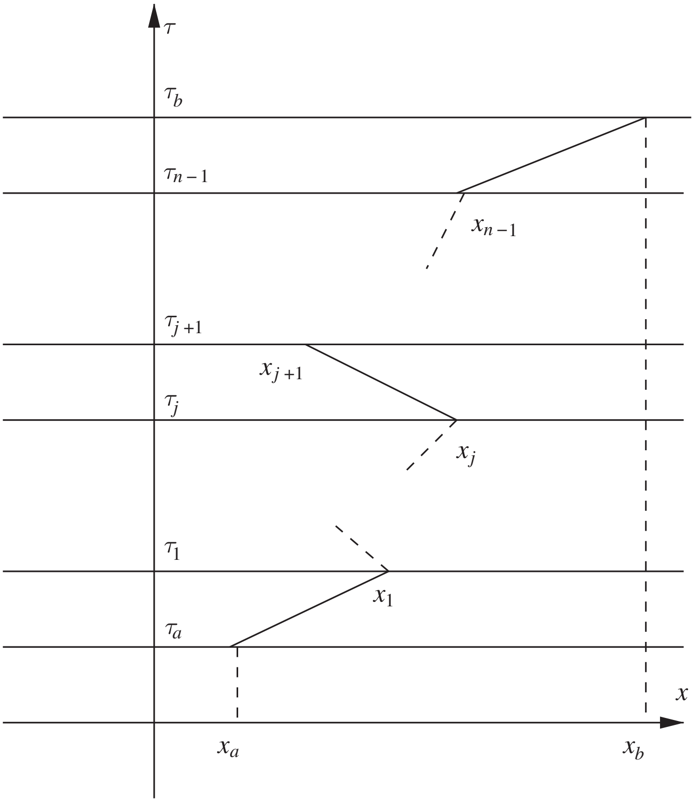



FIG. 12.1 – Découpage de l'intervalle d'intégration $[\tau_a, \tau_b]$ en $n$ intervalles de longueur $\varepsilon = (\tau_b - \tau_a)/n$.

Ce type d'intégrale est appelé *intégrale fonctionnelle* ou *intégrale de chemin.* Il faut souligner que l'écriture de (12.31) est purement formelle, et que pour toute évaluation concrète, on doit se ramener à (12.29). En réalité, le passage d'une somme de Riemann à une intégrale n'est pas justifié parce que $\mathrm{d}x/\mathrm{d}\tau$ n'existe pas pour les chemins qui donnent la contribution principale à (12.31). En effet, on déduit de (12.25) l'écart quadratique moyen de la position au temps $\tau$

$$\langle x^2 \rangle = 2D\tau$$

ce qui est la relation classique pour un processus de diffusion. Un chemin correspondant à un processus markovien et qui vérifie cette équation pour $\tau \to 0$ sera appelé *chemin brownien.* En raison du caractère markovien, les positions successives $x_j$ aux temps $\tau_j$ vérifient la relation suivante

$$\langle (x_{j+1} - x_j)^2 \rangle = 2D(\tau_{j+1} - \tau_j) = 2D\varepsilon \tag{12.32}$$

de sorte que $[\langle (x_{j+1} - x_j)^2 \rangle]^{1/2} \propto \sqrt{\varepsilon}$, ce qui entraîne que le chemin $x(\tau)$ est une fonction continue, mais non dérivable : on ne peut pas définir la vitesse d'une particule brownienne. En dépit de cette difficulté, Wiener a pu définir rigoureusement une mesure (12.31) sur les chemins browniens.

### 12.2.2 Propagateur euclidien et fonction de partition

Notre objectif est de généraliser (12.31) lorsque l'on transpose au cas euclidien une équation de Schrödinger avec potentiel $V(x)$ différent de zéro. Remarquons tout d'abord que le propagateur libre (12.17) se ramène au propagateur en temps imaginaire (12.25) si l'on effectue dans (12.17) les substitutions $t \to -\mathrm{i}\tau$ et $\hbar/2m \to D$, et par conséquent, la probabilité $\mathsf{p}(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a)$ s'écrit comme un élément de matrice dans la représentation position

$$\mathsf{p}(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) = \langle x_b | \mathrm{e}^{-H_0(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | x_a \rangle \tag{12.33}$$

Nous avons vu que nous pouvions écrire (12.33) sous la forme de l'intégrale de chemin (12.31), et nous voulons généraliser ce résultat lorsque l'on ajoute un potentiel $V(x)$ à $H_0$

$$H_0 \to H = H_0 + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

en évaluant le *propagateur euclidien*

$$K_E(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) = \langle x_b | \mathrm{e}^{-H(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | x_a \rangle \tag{12.34}$$

Comme ci-dessus, nous divisons l'intervalle $[\tau_b, \tau_a]$ en $n$ sous-intervalles de longueur $\varepsilon$, $(\tau_b - \tau_a) = n\varepsilon$, et nous utilisons la formule de Trotter pour deux opérateurs $A$ et $B$

$$\mathrm{e}^{A+B} = \lim_{n\to\infty} \left( \mathrm{e}^{A/n}\, \mathrm{e}^{B/n} \right)^n \tag{12.35}$$

Cette formule est facile à montrer dans le cas où $A$ et $B$ sont des opérateurs bornés (exercice 12.7.1). Choisissant

$$A = -(\tau_b - \tau_a)H_0/\hbar \qquad B = -(\tau_b - \tau_a)V/\hbar$$

nous obtenons

$$\mathrm{e}^{-H(\tau_b - \tau_a)/\hbar} = \lim_{n\to\infty} \left( \mathrm{e}^{-\varepsilon H_0/\hbar}\, \mathrm{e}^{-\varepsilon V/\hbar} \right)^n$$

L'étape suivante consiste à écrire (exercice 12.7.1)

$$\mathrm{e}^{-\varepsilon H_0/\hbar}\, \mathrm{e}^{-\varepsilon V/\hbar} = \mathrm{e}^{-\varepsilon V/2\hbar}\, \mathrm{e}^{-\varepsilon H_0/\hbar}\, \mathrm{e}^{-\varepsilon V/2\hbar} + O(\varepsilon^3)$$

On introduit aux temps euclidiens $\tau_j = \tau_a + j\varepsilon$, $j = 1, 2, \ldots, n-1$, $\tau_0 = \tau_a, \tau_n = \tau_b$ un ensemble complet de vecteurs propres de l'opérateur position $X$

$$\int \mathrm{d}x_j |x_j\rangle\langle x_j| = I$$

ce qui conduit à des éléments de matrice

$$\langle x_{j+1}|\mathrm{e}^{-\varepsilon V/2\hbar}\,\mathrm{e}^{-\varepsilon H_0/\hbar}\,\mathrm{e}^{-\varepsilon V/2\hbar}|x_j\rangle = \mathrm{e}^{-\varepsilon[V(x_{j+1})+V(x_j)]/2}\,\langle x_{j+1}|\mathrm{e}^{-\varepsilon H_0/\hbar}|x_j\rangle$$

Le second élément de matrice a déjà été évalué, car c'est tout simplement un propagateur euclidien libre (12.27) avec $D = \hbar/2m$

$$\langle x_{j+1}|\mathrm{e}^{-\varepsilon H_0/\hbar}|x_j\rangle = \mathsf{p}(x_{j+1},\tau_{j+1}|x_j,\tau_j) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}}\,\exp\left[-\frac{m(x_{j+1}-x_j)^2}{2\hbar\varepsilon}\right]$$

et l'on trouve pour $K_E$

$$\begin{aligned} K_E(x_b,\tau_b|x_a,\tau_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}}\int\prod_{j=1}^{n-1}\mathrm{d}x_j\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}} \\ \times\exp\left[-\sum_{j=1}^{n-1}\frac{m(x_{j+1}-x_j)^2}{2\hbar\varepsilon}\right]\exp\left[-\frac{\varepsilon}{\hbar}\sum_{j=1}^{n-1}V(x_j)\right] \end{aligned} \tag{12.36}$$

La présence de $x_j$ comme argument de $V$ n'est pas essentielle : ainsi que nous le verrons dans le § 12.3.2, $x_{j+1}$, $(x_{j+1}+x_j)/2$, ou tout point intermédiaire entre $x_{j+1}$ et $x_j$ feraient aussi bien l'affaire ; voir également l'exercice 12.7.5. Comme précédemment, on simplifie l'écriture en passant formellement à une intégrale de chemin

$$\boxed{K_E(x_b,\tau_b|x_a,\tau_a) = \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b}\mathcal{D}x(\tau)\,\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\left(\frac{1}{2}\,m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V(x(\tau))\right)\mathrm{d}\tau\right]} \tag{12.37}$$

L'interprétation intuitive de (12.37) est la suivante : dans le calcul du propagateur, chacun des chemins $x(\tau)$ partant de $x_a$ au temps euclidien $\tau_a$ et arrivant en $x_b$ au temps euclidien $\tau_b$ est affecté du poids statistique

$$\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{\tau_a}^{\tau_b}H(x(\tau))\mathrm{d}\tau\right]$$

et le propagateur s'obtient en sommant sur tous les chemins possibles, compte tenu des conditions aux limites. Le point clé pour comprendre (12.37) est le suivant : quel que soit $V(x)$ le comportement aux temps courts du mouvement de la particule est dominé par la diffusion, $\langle(\Delta x)^2\rangle \propto \Delta\tau$ pour $\Delta\tau \to 0$. La mesure d'intégration, celle qui définit les chemins dominants dans le calcul de (12.37) est la *mesure de Wiener*

$$\mathcal{D}x(\tau)\,\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\left(\frac{1}{2}\,m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2\right)\right]$$

qui peut être traitée de façon mathématiquement rigoureuse. Il est instructif de vérifier directement (exercice 12.7.5) que $K_E(x,\tau|x_0,\tau_0)$ obéit à l'équation de Schrödinger en temps euclidien

$$\frac{\partial K_E}{\partial \tau} = -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right) K_E = -HK_E \tag{12.38}$$

L'équation (12.37) permet d'obtenir la fonction de partition à la température $T$ d'une particule quantique de hamiltonien $H$ sous forme d'intégrale de chemin. En effet, cette fonction de partition $Z(\beta)$, $\beta = 1/k_\mathrm{B}T$, est donnée par une trace

$$Z(\beta) = \mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta H} = \int \mathrm{d}x \langle x|\mathrm{e}^{-\beta H}|x\rangle \tag{12.39}$$

d'où l'expression de $Z(\beta)$ sous forme d'intégrale de chemin[6]

$$Z(\beta) = \int_{x(0)=x(\beta\hbar)} \mathcal{D}x(\tau) \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\left(\frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V(x(\tau))\right)\mathrm{d}\tau\right] \tag{12.40}$$

L'intégrale porte sur tous les chemins périodiques : $x(0) = x(\beta\hbar)$. Comme l'opérateur statistique de l'ensemble canonique est $\rho = \exp(-\beta H)/Z(\beta)$, le propagateur euclidien est un élément de matrice $\rho(x_b, x_a; \beta\hbar)$ de l'opérateur statistique dans la représentation $x$, au facteur $Z(\beta)$ près

$$\langle x_b|\mathrm{e}^{-\beta H}|x_a\rangle = Z(\beta)\rho(x_b, x_a; \beta\hbar) \tag{12.41}$$

Enfin, on peut donner une interprétation du propagateur euclidien cette fois en termes de mécanique statistique *classique*, en considérant $x(\tau)$ comme un champ aléatoire classique, le poids statistique de Boltzmann de la configuration $x(\tau)$ étant donné par (12.37). La limite $\tau_a \to -\infty$, $\tau_b \to +\infty$ conduit à une remarque intéressante. En introduisant l'opérateur $X(\tau)$ dans la "représentation de Heisenberg euclidienne"

$$X_\mathrm{H}(\tau) = \mathrm{e}^{H\tau/\hbar}\, X\, \mathrm{e}^{-H\tau/\hbar} \tag{12.42}$$

et en étudiant les éléments de matrice du produit $X_\mathrm{H}(\tau_1)X_\mathrm{H}(\tau_2)$, on peut montrer (exercice 12.7.2) que la longueur de corrélation du système classique est directement liée à la différence entre le niveau fondamental $E_0$ et le premier niveau excité $E_1$ du système quantique associé. C'est là un exemple de correspondance remarquable entre une propriété d'un problème de mécanique statistique et une propriété d'un problème de mécanique quantique associé.

6. Cette équation est fondamentale en mécanique statistique quantique. Elle est, par exemple, à la base de la méthode numérique dite de Monte-Carlo quantique, exposée par exemple dans Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 7.

### 12.2.3 Intégrale de chemin de Feynman

En substituant au temps euclidien $\tau$ le temps ordinaire $t$, on passe du propagateur euclidien (12.34) au propagateur quantique $K$

$$K(x_b, t_b|x_a, t_a) = \langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t_b-t_a)/\hbar}|x_a\rangle \tag{12.43}$$

Compte tenu de

$$\mathrm{d}\tau = \mathrm{i}\mathrm{d}t \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau} = -\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$$

la représentation de $K$ sous forme d'une intégrale de chemin se déduit immédiatement de (12.37)

$$\boxed{K(x_b, t_b|x_a, t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\left(\frac{1}{2}\,m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(x(t))\right)\mathrm{d}t\right]} \tag{12.44}$$

où $\mathcal{D}x(t)$ doit se comprendre comme dans (12.30)

$$\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) = \lim_{\varepsilon\to 0}\sqrt{\frac{m}{2\mathrm{i}\pi\hbar\varepsilon}}\int\prod_{j=1}^{n-1}\mathrm{d}x_j\sqrt{\frac{m}{2\mathrm{i}\pi\hbar\varepsilon}} \tag{12.45}$$

La quantité qui apparaît dans l'intégrand de l'exponentielle de (12.44) est le *lagrangien* $\mathcal{L}$ de la particule (on notera le signe moins devant le potentiel !)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\,m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(x(t)) \tag{12.46}$$

dont l'intégrale sur le temps est *l'action* $S$

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b}\left(\frac{1}{2}\,m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(x(t))\right)\mathrm{d}t \tag{12.47}$$

On peut donc récrire $K$ sous la forme

$$K(x_b, t_b|x_a, t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}S[x(t)]/\hbar} \tag{12.48}$$

où $S[x(t)]$ est l'action classique[7] pour le chemin $x(t)$ : un chemin $x(t)$ est donc affecté d'un poids $\exp(\mathrm{i}S/\hbar)$ dans l'intégrale de chemin. L'action correspondant à un élément de chemin $x_j \to x_{j+1}$ de la figure 12.1 est

$$\Delta S = \frac{1}{2}\,m\frac{(x_{j+1}-x_j)^2}{\varepsilon} - \varepsilon V(x_j)$$

7. $S$ est une *fonctionnelle* du chemin. La notation entre crochets $S[x(t)]$ indique que l'on a affaire à une fonctionnelle de $x(t)$.

Si $|x_{j+1} - x_j| \gg (\hbar\varepsilon/m)^{1/2}$, le facteur $\exp(\mathrm{i}S/\hbar)$ oscille un grand nombre de fois quand on passe d'un chemin à un chemin voisin : les contributions principales viennent des chemins browniens. Il faut souligner que dans (12.45) ou (12.48), on intègre sur tous les chemins possibles tels que $x(t_a) = x_a$ et $x(t_b) = x_b$, et pas seulement sur les trajectoires classiques, celles qui obéissent aux équations du mouvement ! *Le formalisme de l'intégrale de chemin fait intervenir uniquement des quantités classiques, des nombres et des fonctions. Il offre une formulation alternative de la mécanique quantique, où n'interviennent ni les espaces de Hilbert, ni les opérateurs.*

Les trajectoires classiques $x_{\rm cl}(t)$ (il peut y en avoir plusieurs) sont celles qui rendent l'action stationnaire

$$\frac{\delta S}{\delta x(t)}\bigg|_{x(t)=x_{\rm cl}(t)} = 0 \tag{12.49}$$

Considérons un chemin $x(t)$, soit $S$ l'action correspondante et supposons $S \gg \hbar$. Si $|S - S_{\rm cl}| \gg \hbar$, alors le facteur $\exp(\mathrm{i}S/\hbar)$ oscille un grand nombre de fois quand on passe de $x_{\rm cl}(t)$ à $x(t)$, et un tel chemin va contribuer de façon négligeable au propagateur $K$. Lorsque l'action classique est grande par rapport à $\hbar$, l'intégrale de chemin est dominée par les trajectoires proches des trajectoires classiques, et on pourra envisager un développement en puissances de $\hbar$ autour de ces trajectoires. En physique statistique, l'approximation correspondante est l'approximation de Landau.

Une application importante des intégrales de chemin est l'écriture des *produits ordonnés dans le temps d'opérateurs*, aussi appelés *produits-T d'opérateurs*. Considérons l'élément de matrice suivant pour $t > t'$

$$F(x_b, t_b; t, t'; x_a, t_a) := \langle x_b|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t_b-t)/\hbar}\, X\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-t')/\hbar}\, X\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t'-t_a)\hbar}|x_a\rangle \quad t > t' \tag{12.50}$$

où $X$ est l'opérateur position, et choisissons le chemin en zig-zag de la figure 12.1 pour évaluer cet élément de matrice. Comme $x_j$ est la position de la particule au temps $t_j$, $x_j = x(t_j)$, nous obtenons en introduisant un système complet d'états propres de $X$

$$\int \mathrm{d}x_j\, X|x_j\rangle\langle x_j| = \int \mathrm{d}x_j\, x_j|x_j\rangle\langle x_j| = \int \mathrm{d}x_j\, x(t_j)|x_j\rangle\langle x_j|$$

Mais nous pouvons exprimer $F$ en terme de l'opérateur position dans la représentation de Heisenberg

$$X_{\rm H}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}\, X\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar} \tag{12.51}$$

en définissant $|x, t\rangle$ par

$$|x, t\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}\,|x\rangle \tag{12.52}$$

Lorsque $t > t'$, $F$ s'écrit

$$F = \langle x_b, t_b|X_{\rm H}(t)\, X_{\rm H}(t')|x_a, t_a\rangle$$

tandis que pour $t < t'$

$$F = \langle x_b, t_b | X_\mathrm{H}(t')\, X_\mathrm{H}(t) | x_a, t_a \rangle$$

Nous allons tenir compte des deux ordres possibles de $t$ et $t'$ en définissant le produit-$T$ d'opérateurs position $X$ dans la représentation de Heisenberg par

$$\begin{aligned} T\big(X_\mathrm{H}(t)X_\mathrm{H}(t')\big) &= X_\mathrm{H}(t)X_\mathrm{H}(t') \qquad && t > t' \\ &= X_\mathrm{H}(t')X_\mathrm{H}(t) \qquad && t' > t \end{aligned} \tag{12.53}$$

Nous obtenons la représentation de l'élément de matrice du produit-$T$ sous forme d'intégrale de chemin de $F$, valable quel que soit l'ordre des temps $t$ et $t'$

$$\begin{aligned} \langle x_b, t_b | T\big(X_\mathrm{H}(t)X_\mathrm{H}(t')\big) | x_a, t_a \rangle = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} &\mathcal{D}x(t)\, x(t)x(t') \\ &\times \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\left(\frac{1}{2}\, m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(x(t))\right)\mathrm{d}t\right] \end{aligned} \tag{12.54}$$

Cette équation se généralise facilement à la *fonctionnelle génératrice* des produits-$T$, $Z[j(t)]$ (*cf.* la note 7), où $j(t)$ est appelé *source* (exercice 12.7.3)

$$Z([j]; x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t)\, \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\, S[x(t)] + \mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b} j(t)x(t)\mathrm{d}t\right] \tag{12.55}$$

qui permet de calculer les éléments de matrice de produits-$T$ par différentiation fonctionnelle, par exemple

$$\begin{aligned} &\langle x_b, t_b | T\big(X_\mathrm{H}(t)X_\mathrm{H}(t')\big) | x_a, t_a \rangle = \\ &\qquad \frac{(-\mathrm{i})^2}{Z([j=0]; x_b, t_b; x_a, t_a)} \times \left.\frac{\delta^2 Z([j]; x_b, t_b; x_a, t_a)}{\delta j(t)\delta j(t')}\right|_{j=0} \end{aligned} \tag{12.56}$$

où la valeur moyenne du produit-$T$ a été normalisée en divisant par $Z([j=0]; x_b, t_b; x_a, t_a)$.

## 12.3 Applications de l'intégrale de chemin

### 12.3.1 Oscillateur harmonique

Le cas de l'oscillateur harmonique est instructif car on peut mener jusqu'au bout des calculs analytiques. Afin de simplifier les formules, nous utiliserons

(*uniquement dans cette sous-section*) un système d'unités où $\hbar = m = 1$. En présence d'une source $j(t)$, le lagrangien est

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\,\dot{x}^2 - \frac{1}{2}\,\omega^2 x^2 + j(t)x(t) \tag{12.57}$$

l'équation du mouvement correspondante étant

$$\ddot{x} + \omega^2 x = j(t) \tag{12.58}$$

L'expression explicite de la fonctionnelle génératrice est

$$Z([j]; x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) \exp\left[\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \left(\frac{1}{2}\,\dot{x}^2 - \frac{1}{2}\,\omega^2 x^2 + j(t)x(t)\right)\right] \tag{12.59}$$

En procédant de façon un peu cavalière, on effectue une intégration par parties dans l'intégrale sur $t$

$$\begin{aligned} Z([j]; x_b, t_b; x_a, t_a) = &\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) \\ &\times \exp\left[\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \left(-\frac{1}{2}\,x\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2\right]x + j(t)x(t)\right)\right] \end{aligned} \tag{12.60}$$

L'intégrale dans (12.60) est une intégrale gaussienne que l'on calcule explicitement[8]

$$Z([j]; x_b, t_b; x_a, t_a) = Z([j=0]; x_b, t_b; x_a, t_a) \exp\left[-\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\, j(t) D(t-t') j(t')\right] \tag{12.61}$$

où $D(t)$ est une fonction de Green de l'oscillateur harmonique (à un facteur $-\mathrm{i}$ près)

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2\right) D(t) = -\mathrm{i}\delta(t) \tag{12.62}$$

$D(t)$ est “l'inverse” de l'opérateur $\mathrm{i}(\mathrm{d}^2/\mathrm{d}t^2 + \omega^2)$. Toutefois, comme nous l'avons déjà remarqué, l'équation (12.62) ne définit pas $D(t)$ de façon unique, et cette équation doit être complétée par des conditions aux limites choisies en fonction du problème posé (exercice 12.7.4). Le calcul explicite de $Z$ est

8. L'exercice 2.5.7, eq. (2.69), montre que pour calculer une intégrale gaussienne, il faut inverser la matrice $A$ qui intervient dans l'exposant de (12.61). Cet inverse est donné par la solution de (12.62).

possible (exercice 12.7.6), et l'on trouve

$$\begin{aligned}Z([j];x_b,t_b;x_a,t_a) = \left(\frac{\omega}{2\mathrm{i}\pi\sin\omega t}\right)^{1/2} &\times \exp\left\{\frac{\mathrm{i}\omega}{2\sin\omega t}\left[(x_a^2+x_b^2)\cos\omega t - 2x_a x_b\right]\right.\\ &+ \frac{\mathrm{i}x_a}{\sin\omega t}\int_{t_a}^{t_b}\sin[\omega(t_b-t')]j(t')\mathrm{d}t'\\ &+ \frac{\mathrm{i}x_b}{\sin\omega t}\int_{t_a}^{t_b}\sin[\omega(t'-t_a)]j(t')\mathrm{d}t'\\ &- \frac{\mathrm{i}}{\omega\sin\omega t}\int\int \mathrm{d}t'\mathrm{d}t'' j(t')\theta(t'-t'')\\ &\left.\times\sin[\omega(t_b-t')]\sin[\omega(t''-t_a)]j(t'')\right\}\end{aligned} \tag{12.63}$$

## 12.3.2 Intégrale de chemin en présence d'un champ magnétique

Le lagrangien d'une particule chargée de charge $q$ dans un champ magnétique $\vec{B}$, supposé indépendant du temps pour simplifier, s'écrit en fonction du potentiel vecteur $\vec{A}$ (exercice 7.5.8)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\,m\left(\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(\vec{r}(t)) + q\vec{A}\cdot\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t} \tag{12.64}$$

Suivant (12.44), le propagateur prend la forme d'une intégrale de chemin

$$\begin{aligned}K(\vec{r}_b,t_b|\vec{r}_a,t_a) = \int_{\vec{r}(t_a)=\vec{r}_a}^{\vec{r}(t_b)=\vec{r}_b}\mathcal{D}\vec{r}(t)\exp&\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\left(\frac{1}{2}\,m\left(\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t}\right)^2\right.\right.\\ &\left.\left.- V(\vec{r}(t)) + q\vec{A}\cdot\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t}\right)\mathrm{d}t\right]\end{aligned} \tag{12.65}$$

Nous allons examiner l'action d'une transformation de jauge sur cette expression, ce qui va nous permettre de découvrir une subtilité du découpage de la figure 12.1 que nous avions passée sous silence jusqu'à présent. Effectuons une transformation de jauge (10.58) sur $\vec{A}$

$$\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla}\Lambda$$

Dans ces conditions, on obtient une contribution supplémentaire à l'intégrale de l'exponentielle dans (12.65)

$$\frac{-\mathrm{i}q}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\left(\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t}\right)\cdot\vec{\nabla}\Lambda = \frac{-\mathrm{i}q}{\hbar}\int_{\vec{r}_a}^{\vec{r}_b}\vec{\nabla}\Lambda\cdot\mathrm{d}\vec{r} = \frac{-\mathrm{i}q}{\hbar}\left[\Lambda(\vec{r}_b) - \Lambda(\vec{r}_a)\right] \tag{12.66}$$

Ainsi que nous allons le voir bientôt, le passage de la seconde à la troisième expression de (12.66) qui semble pourtant évident, est en fait purement formel.

En admettant pour l'instant la validité de cette manipulation formelle, la transformation de jauge agit donc de la façon suivante sur le propagateur

$$K(\vec{r}_b, t_b|\vec{r}_a, t_a) \to K'(\vec{r}_b, t_b|\vec{r}_a, t_a) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r}_b)/\hbar} K(\vec{r}_b, t_b|\vec{r}_a, t_a)\mathrm{e}^{\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r}_a)/\hbar} \tag{12.67}$$

Vérifions que cette loi de transformation du propagateur est bien compatible avec la transformation de jauge (10.58). En effet, d'après (12.10)

$$K(\vec{r}_b, t_b|\vec{r}_a, t_a) = \sum_{n,s} \varphi_{ns}(\vec{r}_b)\varphi^*_{ns}(\vec{r}_a)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t_b - t_a)/\hbar}$$

et l'action de la transformation de jauge (10.55) est

$$\varphi_{ns}(\vec{r}) \to \varphi'_{ns}(\vec{r}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\Lambda(\vec{r})/\hbar}\,\varphi_{ns}(\vec{r})$$

Rappelons que si $\varphi$ obéit à une équation de Schrödinger où figure le potentiel $\vec{A}$, alors $\varphi'$ obéit à une équation de Schrödinger où $\vec{A}$ est remplacé par le potentiel vecteur transformé de jauge $\vec{A}'$, et la loi de transformation (12.67) de $K$ est bien celle que l'on déduit de la transformation des fonctions d'onde. La conclusion de cette étude de l'invariance de jauge est que la manipulation formelle (12.66) doit être correcte, ce que nous allons justifier.

Venons-en donc à la justification de (12.66). Afin de simplifier l'argument, revenons provisoirement au cas unidimensionnel et à la version euclidienne de l'intégrale de chemin. Nous avons à évaluer une intégrale du type

$$\int_{x_a}^{x_b} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x$$

le long de chemins browniens. Le résultat remarquable observé pour la première fois par Itô est que, en règle générale,

$$\int_{x_a}^{x_b} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x \neq \varphi(x_b) - \varphi(x_a)$$

Ce résultat surprenant vient de ce que pour un chemin brownien $(\Delta x)^2 \propto \Delta\tau$ si $\Delta\tau \to 0$. Choisissons un chemin en zig-zag de la figure 12.1 avec des points $x_0 = x_a, x_1, \ldots, x_{n-1}, x_n = x_b$ et partons de l'identité

$$\varphi(x_b) - \varphi(x_a) = \sum_{j=0}^{n-1} \big[\varphi(x_{j+1}) - \varphi(x_j)\big] \tag{12.68}$$

Supposant la fonction $\varphi$ suffisamment régulière, effectuons un développement de Taylor en puissances de $(x_{j+1} - x_j)$ de $\big[\varphi(x_{j+1}) - \varphi(x_j)\big]$ autour du point

$$u_{\lambda j} = x_j + \lambda(x_{j+1} - x_j)$$

avec $0 \leq \lambda \leq 1$. Ce développement permet de récrire la somme dans (12.68) à l'ordre $(x_{j+1} - x_j)^2$

$$\varphi(x_b) - \varphi(x_a) = \sum_{j=0}^{n-1} \left[ (x_{j+1} - x_j)\varphi'(u_{\lambda j}) + \frac{1}{2}(x_{j+1} - x_j)^2(1 - 2\lambda)\varphi''(u_{\lambda j}) \right] + O\left((x_{j+1} - x_j)^3\right)$$

Mais nous avons vu que pour un chemin brownien

$$\langle (x_{j+1} - x_j)^2 \rangle = 2D(\tau_{j+1} - \tau_j) = 2D\varepsilon$$

et par conséquent, en prenant la somme sur les chemins browniens

$$\varphi(x_b) - \varphi(x_a) = \sum_{j=0}^{n-1} \left[ (x_{j+1} - x_j)\varphi'(u_{\lambda j}) + D(1 - 2\lambda)(\tau_{j+1} - \tau_j)\varphi''(u_{\lambda j}) \right] + O\left((x_{j+1} - x_j)^3\right)$$

Nous pouvons maintenant prendre la limite $(x_{j+1} - x_j) \to 0$, car les termes $O((x_{j+1} - x_j)^3)$ sont d'ordre $(\tau_{j+1} - \tau_j)^{3/2} \propto \varepsilon^{3/2}$ et ne contribuent pas dans cette limite. On obtient alors le résultat d'Itô

$$\varphi(x_b) - \varphi(x_a) = \int_{x_a}^{x_b} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\, \mathrm{d}x + D(1 - 2\lambda) \int_{\tau_a}^{\tau_b} \frac{\mathrm{d}^2\varphi(x(\tau))}{\mathrm{d}x^2} \mathrm{d}\tau \tag{12.69}$$

Pour éliminer le second terme du membre de droite de (12.69), il faut choisir $\lambda = 1/2$, ou, en d'autres termes, il faut choisir dans le découpage de l'intégrale de chemin l'argument de $\varphi$ au point $(x_{j+1} + x_j)/2$, au milieu de l'intervalle $[x_j, x_{j+1}]$. L'argument exposé ci-dessus permet également de comprendre pourquoi le calcul de l'intégrale de $V(x(\tau))$ dans l'exponentielle de (12.40) ne dépend pas du choix de $\lambda$ : on peut choisir $V(x_j)$, $V(x_{j+1}$ ou $V[(x_j + x_{j+1})/2])$

$$\varepsilon \sum_j V(u_{\lambda j}) = \varepsilon \sum_j V(x_j) + \varepsilon\lambda \sum_j (x_{j+1} - x_j)V'(x_j) + \cdots$$

Comme $\varepsilon\lambda(x_{j+1} - x_j) \propto \varepsilon^{3/2}$, le deuxième terme de la somme ne contribue pas à la limite $\varepsilon \to 0$. Les ambiguïtés ne peuvent se produire que pour des potentiels dépendant de la vitesse.

Revenant au propagateur en présence d'un champ magnétique, nous voyons que l'invariance de jauge ne sera satisfaite que si l'on peut écrire (12.66), c'est-à-dire si on choisit comme argument de $\vec{A}$ le vecteur $(\vec{r}_{j+1} + \vec{r}_j)/2$

$$\int_{t_a}^{t_b} \vec{A} \cdot \frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t}\, \mathrm{d}t = \lim_{\varepsilon \to 0} \sum_j \varepsilon \vec{A} \left( \frac{\vec{r}_{j+1} + \vec{r}_j}{2} \right) \cdot \left( \frac{\vec{r}_{j+1} - \vec{r}_j}{\varepsilon} \right) \tag{12.70}$$

Une démonstration plus directe de ce résultat s'inspire de de la méthode utilisée dans l'exercice 12.7.5 : comme l'algèbre est un peu fastidieuse, nous renvoyons le lecteur au livre de Schulman [1981], chapitre 4, où l'on montre que le choix effectué dans (12.70) est nécessaire si l'on veut que $\varphi$ obéisse à l'équation de Schrödinger en présence d'un potentiel vecteur.

### 12.3.3 L'effet Aharonov-Bohm

En physique classique, on considère que les potentiels scalaire $\overline{V}$ et vecteur $\vec{A}$ sont des intermédiaires de calcul, certes extrêmement utiles, mais qu'en dernière analyse seuls les champs $\vec{E}$ et $\vec{B}$ ont une signification physique car l'action sur les particules chargées décrite par la loi de Lorentz (1.11) ne dépend que de $\vec{E}$ et $\vec{B}$. Comme dans la section précédente, nous nous limitons pour simplifier à un champ magnétique indépendant du temps. Si une particule chargée traverse une région d'espace où $\vec{B} = 0$, elle ne subit aucun effet puisque la force de Lorentz est nulle. Comme nous allons le voir sur l'exemple de l'effet Aharonov-Bohm (A-B), la situation est plus subtile en physique quantique. Reprenons la discussion de l'expérience des fentes d'Young en la réalisant avec des particules chargées, et en disposant derrière les fentes un solénoïde très fin tel que $\vec{B}$ s'annule dans toute région de l'espace où la probabilité de présence des particules est non nulle (figure 12.2). Cette région est fixée par le diagramme de diffraction des deux fentes. On pourrait s'attendre à ce que la présence du solénoïde n'ait aucun effet observable, en particulier il ne devrait pas affecter le diagramme d'interférences sur l'écran $E$. Nous allons montrer qu'il n'en est rien. Soit $\varphi_1(\vec{r}_b, t_b)$ et $\varphi_2(\vec{r}_b, t_b)$ les amplitudes de probabilité de trouver au temps $t_b$ la particule au point $\vec{r}_b$ de l'écran quand elle est passée par la fente 1 ($\varphi_1$) ou par la fente 2 ($\varphi_2$). En l'absence de champ magnétique, les amplitudes $\varphi_1(\vec{r}_b, t_b)$ et $\varphi_2(\vec{r}_b, t_b)$ peuvent être calculées à partir de (12.2) par une intégrale de chemin en fonction de l'amplitude de probabilité à la source $\varphi(\vec{r}_a, t_a)$

$$\varphi_i(\vec{r}_b, t_b) = \int \mathrm{d}^3 r_a \int_{a(i)}^{b} \mathcal{D}(\vec{r}(t)) \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(\vec{r}(t))\mathrm{d}t\right] \varphi(\vec{r}_a, t_a) \qquad (12.71)$$

où le chemin $i$, $i = 1, 2$, passe par la fente $(i)$. En présence du solénoïde, l'exponentielle dans (12.71) devient

$$\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(\vec{r}(t))\mathrm{d}t\right] \exp\left[\frac{\mathrm{i}q}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \vec{A}\cdot\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{d}t\right]$$

et l'exponentielle originale est donc multipliée par le facteur dépendant du chemin (1 ou 2)

$$\exp\left[\frac{\mathrm{i}q}{\hbar}\int_{\vec{r}_a(i)}^{\vec{r}_b} \vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{r}\right] \qquad (12.72)$$

Ce facteur est indépendant du temps, et par la suite nous supprimons la dépendance par rapport à $t$, qui ne joue aucun rôle ici, en supposant un flux continu de particules. L'amplitude de probabilité pour trouver la particule en

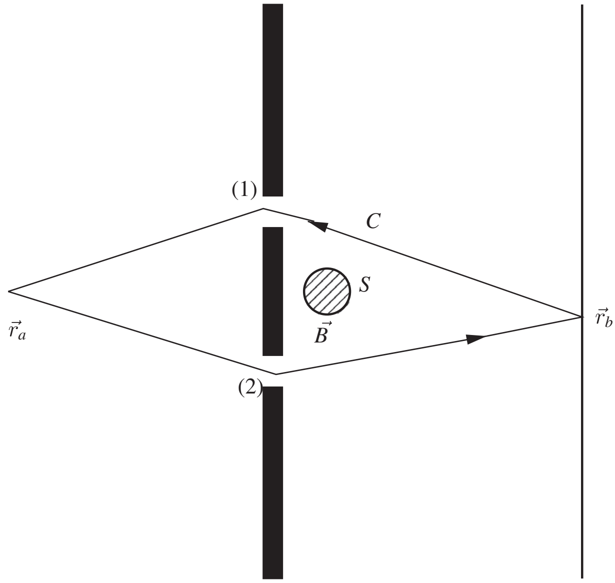



FIG. 12.2 – L'effet Aharonov-Bohm. La probabilité de présence des électrons est négligeable au voisinage du solénoïde $S$. Le champ magnétique $\vec{B}$ est perpendiculaire au plan de la figure.

$\vec{r}_b$ sur l'écran au temps $t_b$ est

$$\begin{aligned}\varphi_1(\vec{r}_b)\ \exp\left[\frac{\mathrm{i}q}{\hbar}\int_{\vec{r}_a(1)}^{\vec{r}_b}\vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{r}\right]&+\varphi_2(\vec{r}_b)\exp\left[\frac{\mathrm{i}q}{\hbar}\int_{\vec{r}_a(2)}^{\vec{r}_b}\vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{r}\right]\\ &=\exp\left[\frac{\mathrm{i}q}{\hbar}\int_{\vec{r}_a(1)}^{\vec{r}_b}\vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{r}\right]\left(\varphi_1(\vec{r}_b)+\varphi_2(\vec{r}_b)\exp\left[\frac{\mathrm{i}q}{\hbar}\oint_C\vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{r}\right]\right)\end{aligned}$$

Le premier facteur de la seconde ligne est un facteur de phase global qui n'affecte pas le diagramme d'interférences. Le second facteur de phase est donné par une intégrale sur le contour fermé $C$ formé par le chemin passant par la fente 1 et celui passant par la fente 2 (figure 12.2)

$$\int_2 \mathrm{d}\vec{r}\,(\bullet) - \int_1 \mathrm{d}\vec{r}\,(\bullet) = \oint_C \mathrm{d}\vec{r}\,(\bullet)$$

L'argument de l'exponentielle en facteur de $\varphi_2$ est

$$\frac{\mathrm{i}q}{\hbar}\oint_C \vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{r} = \frac{\mathrm{i}q}{\hbar}\int\int \vec{B}\cdot\mathrm{d}\vec{\mathcal{S}} = \frac{\mathrm{i}q\Phi}{\hbar} \tag{12.73}$$

où $\Phi$ est le flux du champ magnétique à travers le chemin fermé $C$, c'est-à-dire le flux du solénoïde, puisque $\vec{B}$ est supposé négligeable le long des trajectoires

suivies par les particules. Le diagramme d'interférences est donc déterminé par

$$\left|\varphi_1(\vec{r}_b) + \mathrm{e}^{\mathrm{i}q\Phi/\hbar}\,\varphi_2(\vec{r}_b)\right|^2$$

En un point fixé $\vec{r}_b$, le diagramme d'interférences varie sinusoïdalement avec $\Phi$, avec une période

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{q} = \frac{h}{q} \simeq 4 \times 10^{-15}\,\mathrm{Wb} \tag{12.74}$$

Si, par exemple, $\Phi = h/2q$, un maximum d'interférences en l'absence de champ est transformé en un minimum lorsque le solénoïde est présent. Cet effet du solénoïde sur le diagramme d'interférences est appelé *effet Aharonov-Bohm.*

Le passage de particules chargées dans une région où $\vec{B} = 0$, mais où $\vec{A} \neq 0$ produit donc des effets observables. Toutefois, l'effet est invariant de jauge, puisque la modification du diagramme d'interférences ne dépend que du flux du champ magnétique à travers $C$, et donc de $\vec{B}$. Si un des deux chemins pouvait être déformé dans l'autre sans rencontrer de région où $\vec{B} \neq 0$, aucun effet ne serait observable, même avec $\vec{A} \neq 0$ le long des trajectoires. Le facteur $\exp(\mathrm{i}q\Phi/\hbar)$ est un exemple de *facteur de phase topologique*, lié au fait que la topologie de l'espace n'est pas simplement connexe.

On peut donner deux interprétations de l'effet A-B.

(i) Le potentiel vecteur agit *localement* sur les particules chargées : l'argument de $\vec{A}$ est la position $\vec{r}$ de la particule, et on doit accorder une signification physique au potentiel vecteur.

(ii) Comme l'effet est invariant de jauge et peut se calculer en fonction du seul champ $\vec{B}$, le potentiel est un intermédiaire commode, mais non indispensable si l'on admet que l'on peut écrire des interactions non locales entre les particules et le champ.

Le point de vue (i) a le mérite de la simplicité : les interactions sont écrites de façon locale. Mais dans le cadre strict de l'électromagnétisme, il n'y a pas d'argument décisif pour choisir le point de vue (i) plutôt que (ii). En revanche, le point de vue (i) s'impose dans le cas des théories de jauge non abéliennes (exercice 10.4.7), car dans ce cas même les champs ne sont pas invariants de jauge, et il n'y a aucune raison de se compliquer la vie avec des interactions non locales[9].

# 12.4 L'approximation BKW

## 12.4.1 Forme asymptotique de la fonction d'onde

Dans cette section, nous allons exposer une méthode d'approximation qui s'applique lorsque l'on a affaire à une équation différentielle ordinaire, par

9. Il existe aussi un effet A-B scalaire : voir par exemple Rauch et Werner [2000], chapitre 6.

exemple l'équation de Schrödinger à une dimension ou bien l'équation radiale obtenue après séparation des variables. La généralisation sera décrite très brièvement à la fin du § 12.4.4. L'équation de Schrödinger (8.67) indépendante du temps pour une particule d'énergie $E$ dans un espace à une dimension et soumise à un potentiel $V(x)$ peut s'écrire

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} + k^2(x)\varphi(x) = 0 \tag{12.75}$$

si l'on définit $k^2(x)$ par

$$k^2(x) = \frac{p^2(x)}{\hbar^2} = \frac{2m[E - V(x)]}{\hbar^2} \tag{12.76}$$

$k(x)$ est un vecteur d'onde local et $p(x)$ une impulsion locale. Ainsi que nous l'avons déjà remarqué (*cf.* (8.68) et (8.69)), $k(x)$ et $p(x)$ sont réels dans une région où $E > V(x)$, qui est la région classiquement permise, et imaginaires purs dans une région où $E < V(x)$. Écrivons $\varphi(x)$ sous la forme $\varphi(x) = \exp[\mathrm{i}\Phi(x)]$. L'équation de Schrödinger (12.75) devient

$$-\left(\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}x}\right)^2 + \mathrm{i}\left(\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}x^2}\right) + k^2(x) = 0 \tag{12.77}$$

Examinons tout d'abord une région d'espace où $E > V(x)$, $k^2(x) > 0$. Si le potentiel $V(x)$ était indépendant de $x$, $V(x) = V$, nous aurions comme solution $\Phi(x) = \pm kx$, $k = \sqrt{2m(E-V)/\hbar^2}$ et $\mathrm{d}^2\Phi/\mathrm{d}x^2 = 0$. Si $V(x)$ n'est pas constant, mais varie peu sur une distance de l'ordre de la longueur d'onde locale $\lambda(x) = 2\pi/k(x)$, nous nous attendons à ce que $\mathrm{d}^2\Phi/\mathrm{d}x^2$ soit petit comparativement aux deux autres termes de (12.77). L'approximation reposant sur cette variation lente est appelée *approximation BKW* (Brillouin-Kramers-Wentzel). En première approximation, on néglige $\mathrm{d}^2\Phi/\mathrm{d}x^2$ dans (12.77), et notant $\Phi = \Phi_0$ cette approximation

$$\frac{\mathrm{d}\Phi_0}{\mathrm{d}x} = \pm k(x) \qquad \Phi_0(x) = \pm\int^x k(u)\mathrm{d}u \tag{12.78}$$

La condition de validité de cette approximation est $|\Phi''| \ll (\Phi')^2$, soit

$$\left|\frac{\mathrm{d}k(x)}{\mathrm{d}x}\right| \ll k^2(x)$$

ce qui s'écrit, compte tenu de l'expression (12.76) de $k$

$$\left|\frac{\mathrm{d}k(x)}{\mathrm{d}x}\right| = \frac{m}{\hbar^2}\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right|\frac{1}{k(x)} = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\lambda(x)\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right| \ll k^2(x)$$

La condition de validité de l'approximation peut aussi se mettre sous la forme

$$\lambda(x)\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right| \ll \frac{2\pi\hbar^2k^2(x)}{m} = \frac{2\pi p^2(x)}{m} \tag{12.79}$$

En d'autres termes, la variation du potentiel sur une longueur d'onde doit être petite par rapport à l'énergie cinétique locale.

Pour obtenir l'approximation suivante, dont nous nous contenterons, on reporte

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}x^2} \simeq \frac{\mathrm{d}^2\Phi_0}{\mathrm{d}x^2} = \pm\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}x}$$

dans (12.77), avec pour résultat

$$\Phi'(x) = \pm\sqrt{k^2(x) + \mathrm{i}\Phi''(x)} \simeq \pm\sqrt{k^2(x) \pm \mathrm{i}k'(x)}$$

et en développant la racine carrée

$$\Phi(x) \simeq \pm \int^x k(u)\,\mathrm{d}u + \frac{\mathrm{i}}{2}\int^x \frac{k'(u)}{k(u)}\,\mathrm{d}u = \pm\int^x k(u)\,\mathrm{d}u + \frac{\mathrm{i}}{2}\ln k(x)$$

Le résultat pour $\varphi(x)$ qui sera à la base de toute la discussion qui va suivre est finalement

$$\boxed{\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\,\exp\left[\pm\mathrm{i}\int^x k(u)\,\mathrm{d}u\right]} \tag{12.80}$$

La probabilité de présence de la particule est proportionnelle à $1/k(x)$, ce qui se comprend ainsi : dans un mouvement classique entre deux points $x_a$ et $x_b$, la probabilité de présence dans un intervalle $\Delta x$ est inversement proportionnelle à la vitesse de la particule, et donc à $1/k(x)$.

Lorsque $E < V(x)$, la formule (12.80) est encore valable à condition de faire la substitution

$$k(x) \to \mathrm{i}\kappa(x) \qquad \kappa^2(x) = \frac{2m[V(x) - E]}{\hbar^2}$$

La déduction donnée ci-dessus de (12.80) perd toute validité lorsque $E \simeq V(x)$, et il nous faut examiner ce qui se passe près d'un point où $E = V(x)$, appelé *point de rebroussement*[10], car c'est en un tel point que la particule classique rebrousse chemin : ce sont par exemple les points $x_1$ et $x_2$ de la figure 1.15. Supposons donc que $E = V(x)$ au point $x = 0$, et qu'en ce point la pente de $V(x)$ soit négative, de sorte que $k(x)$ est imaginaire pour $x < 0$ et réel pour $x > 0$ : la région permise classiquement correspond à $x > 0$. Pour $x < 0$, et suffisamment loin de $x = 0$, on peut écrire $\varphi(x)$ sous forme d'une combinaison linéraire des solutions indépendantes approchées de (12.75), avec des coefficients $B_1$ et $B_2$[11]

$$x < 0 \ : \qquad \varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\left(B_1 \exp\left[\int_0^x \kappa(u)\,\mathrm{d}u\right] + B_2\,\exp\left[-\int_0^x \kappa(u)\,\mathrm{d}u\right]\right) \tag{12.81}$$

10. En anglais : turning point.

11. Il faut prendre garde au fait que l'argument de la première exponentielle dans (12.81) est négatif : le terme dominant est $B_2$ !

Pour $x > 0$, et suffisamment loin de $x = 0$, la solution devient

$$x > 0 \; : \; \varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left( A_1 \exp\left[ \mathrm{i} \int_0^x k(u)\,\mathrm{d}u \right] + A_2 \exp\left[ -\mathrm{i} \int_0^x k(u)\,\mathrm{d}u \right] \right) \tag{12.82}$$

Les solutions approchées de (12.81)-(12.82) de l'équation originale (12.75) ne sont pas valables au voisinage de $x = 0$, où l'approximation (12.79) n'est pas vérifiée. Ces solutions sont singulières en ce point, car elles présentent un point de branchement à $x = 0$, dû à la racine carrée et à l'exponentielle. *Ces singularités sont des artefacts de l'approximation, car la solutions exacte $\varphi(x)$ n'est pas singulière en ce point.* Il doit être possible de raccorder les solutions approchées (12.81) et (12.82), et c'est ce raccordement qui va fixer les relations entre les coefficients $(A_1, A_2)$ et $(B_1, B_2)$. Cependant, ce raccordement n'est pas évident en raison du phénomène de Stokes, que nous étudierons au § 12.4.3.

### 12.4.2 Formules de raccordement

En supposant que $[E - V(x)]$ s'annule linéairement en $x = 0$, nous allons utiliser une approximation linéaire au voisinage de ce point

$$E - V(x) = Kx \tag{12.83}$$

Le potentiel correspond à un champ de forces constant. L'équation de Schrödinger (12.75) devient au voisinage de $x = 0$

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2mK}{\hbar^2}\, x\varphi(x) = 0 \tag{12.84}$$

Introduisons la variable sans dimension $t$

$$t = \left( \frac{2mK}{\hbar^2} \right)^{1/3} x \tag{12.85}$$

L'équation (12.84) devient avec cette variable

$$\psi''(t) + t\psi(t) = 0 \qquad \psi(t) = \varphi\left[ \left( \frac{\hbar^2}{2mK} \right)^{1/3} x \right] \tag{12.86}$$

À ce point nous devons distinguer les régions $x > 0$ et $x < 0$. Nous allons nous limiter au cas $K > 0$, car les formules du cas $K < 0$ s'en déduisent facilement (exercice 12.7.7). Un théorème sur les équations différentielles nous assure que les solutions de (12.86) sont des fonctions analytiques de $t$. Plus généralement, on montre que si le potentiel $V(x)$ peut être prolongé à des valeurs complexes $z$, et si $V(z)$ est analytique, les solutions $\varphi(z)$ de l'équation de Schrödinger sont aussi des fonctions analytiques de $z$. Les solutions de (12.86) sont les fonctions d'Airy $\mathrm{Ai}(-t)$ et $\mathrm{Bi}(-t)$, dont on trouvera les propriétés dans Abramowitz et

Stegun [1964], p. 446, ou dans Landau et Lifschitz [1966], appendice ; voir également Ballentine [1998], chapitre 5[12]. Elles peuvent s'exprimer en terme des fonctions de Bessel $J_{1/3}(z)$ et $J_{-1/3}(z)$, ce qui est utile pour déterminer leur comportement asymptotique. Le point important est l'expression de leur développement asymptotique pour $t \to +\infty$ $(x > 0)$

$$\mathrm{Ai}(-t) \simeq \frac{t^{-1/4}}{\sqrt{\pi}} \cos\left(z - \frac{\pi}{4}\right) \tag{12.87}$$

$$\mathrm{Bi}(-t) \simeq -\frac{t^{-1/4}}{\sqrt{\pi}} \sin\left(z - \frac{\pi}{4}\right) \tag{12.88}$$

et pour $t \to -\infty$ $(x < 0)$

$$\mathrm{Ai}(-t) \simeq \frac{1}{2}\,\frac{|t|^{-1/4}}{\sqrt{\pi}}\,\mathrm{e}^{-z} \tag{12.89}$$

$$\mathrm{Bi}(-t) \simeq \frac{|t|^{-1/4}}{\sqrt{\pi}}\,\mathrm{e}^{z} \tag{12.90}$$

La variable $z$ est définie par

$$x > 0\,(t > 0)\ :\quad z = \frac{2}{3}\,t^{3/2} = \frac{2}{3}\left(\frac{\hbar^2}{2mK}\right)k^3(x) = \int_0^z k(u)\,\mathrm{d}u \tag{12.91}$$

$$x < 0\,(t < 0)\ :\quad z = \frac{2}{3}\,|t|^{3/2} = \frac{2}{3}\left(\frac{\hbar^2}{2mK}\right)\kappa^3(x) = -\int_0^z \kappa(u)\,\mathrm{d}u \tag{12.92}$$

La solution générale de (12.86) est une combinaison linéaire de $\mathrm{Ai}(-t)$ et de $\mathrm{Bi}(-t)$

$$\psi(t) = C_A \mathrm{Ai}(-t) + C_B \mathrm{Bi}(-t) \tag{12.93}$$

Il est essentiel d'observer que cette solution est valable *à la fois* dans la région $t < 0$ et dans la région $t > 0$ : le point $t = 0$ n'est pas un point singulier de (12.93) car les fonctions $\mathrm{Ai}(-t)$et $\mathrm{Bi}(-t)$ sont des fonctions analytiques de $t$. Un examen superficiel des équations (12.81), (12.82) et (12.93) semble montrer que l'on peut relier $(A_1, A_2)$ à $(B_1, B_2)$ en exprimant ces coefficients en fonction de $C_A$ et $C_B$, compte tenu du développement asymptotique des fonctions d'Airy. En fait, il n'en est rien, car si $C_B \neq 0$, le comportement asymptotique de la fonction Ai pour $x < 0$ est complètement noyé dans le bruit de fond des corrections en $z^{-n} \exp z$ au comportement asymptotique de Bi. Le seul cas où une identification est possible est celui où $C_B = 0$. Les équations (12.87) et (12.89) conduisent alors à la formule de raccordement

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\,\exp\left[\int_0^x \kappa(u)\,\mathrm{d}u\right] \Longrightarrow \frac{2}{\sqrt{k(x)}}\,\cos\left[\int_0^x k(u)\,\mathrm{d}u - \frac{\pi}{4}\right] \tag{12.94}$$

12. Les fonctions d'Airy sont définies de façon conventionnelle comme les solutions de l'équation $\psi''(t) - t\psi(t) = 0$, d'où le signe moins de l'argument de ces fonctions dans (12.87)-(12.90).

Il faut souligner que la flèche dans (12.94) ne fonctionne que dans le sens indiqué. Il est facile de montrer une formule analogue lorsque $K < 0$ (exercice 12.7.7)

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left[-\int_0^x \kappa(u)\,\mathrm{d}u\right] \Longrightarrow \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\int_0^x k(u)\,\mathrm{d}u + \frac{\pi}{4}\right] \qquad (12.95)$$

### 12.4.3 Phénomène de Stokes

Le comportement asymptotique (12.87)-(12.90) des fonctions Ai et Bi est une conséquence du *phénomène de Stokes* que l'on met en évidence en prolongeant la formule (12.82) dans le plan complexe $z = r\exp(\mathrm{i}\theta)$. Concentrons-nous en premier lieu sur les exposants : le premier exposant devient

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\int_0^z k(u)\mathrm{d}u &= \frac{2}{3}\,\mathrm{i}\,z^{3/2} = \frac{2}{3}\,\mathrm{i}\,r^{3/2}\mathrm{e}^{\,3\mathrm{i}\theta/2} \\ &= \frac{2}{3}\,r^{3/2}\left[\cos\left(\frac{3\theta}{2}+\frac{\pi}{2}\right)+\mathrm{i}\sin\left(\frac{3\theta}{2}+\frac{\pi}{2}\right)\right] \end{aligned} \qquad (12.96)$$

Le deuxième exposant s'obtient en changeant $\pi/2$ en $-\pi/2$ dans la seconde ligne de (12.96). Les deux exposants sont réels pour $\theta = \pi/3$, $\theta = \pi$ et $\theta = 5\pi/3$. Les trois demi-droites correspondantes tracées à partir de l'origine dans le plan complexe sont appelées *lignes de Stokes* (figure 12.3). Les deux exposants sont imaginaires purs pour $\theta = 0$, $\theta = 2\pi/3$ et $\theta = 4\pi/3$, et les trois demi-droites correspondantes sont appelées lignes anti-Stokes. Sur les lignes de Stokes, une des deux exponentielles est dominante, car l'un des exposants est positif et l'autre négatif ; rappelons que nous nous intéressons à une situation où $\hbar \to 0$ où les exposants sont grands en valeur absolue.

Le deuxième facteur à prendre en compte dans l'expression asymptotique de la fonction d'onde est

$$k^{-1/2}(z) = z^{-1/4} = r^{-1/4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta/4}$$

Ce facteur impose une coupure dans le plan complexe. La position de cette coupure est arbitraire, et nous la choisirons entre les deux lignes de Stokes à $\theta = \pi$ et $\theta = 5\pi/3$ (figure 12.3). Si nous récrivons (12.82) sous la forme

$$\begin{aligned} \varphi(z) &= A_+\psi_+(z) + A_-\psi_-(z) \\ \psi_\pm(z) &= k^{-1/2}(z)\,\exp\left[\pm\mathrm{i}\int_0^z k(u)\,\mathrm{d}u\right] \end{aligned} \qquad (12.97)$$

nous voyons que $\psi_-$ domine sur la ligne de Stokes $\theta = \pi/3$ et $\psi_+$ sur les deux autres lignes. La détermination du terme dominant dépend de la position de la coupure : si celle-ci était placée entre $\theta = 5\pi/3$ et $\theta = 0$, c'est $\psi_-$ qui dominerait sur la ligne de Stokes $\theta = 5\pi/3$. Lorsque l'on encercle le point

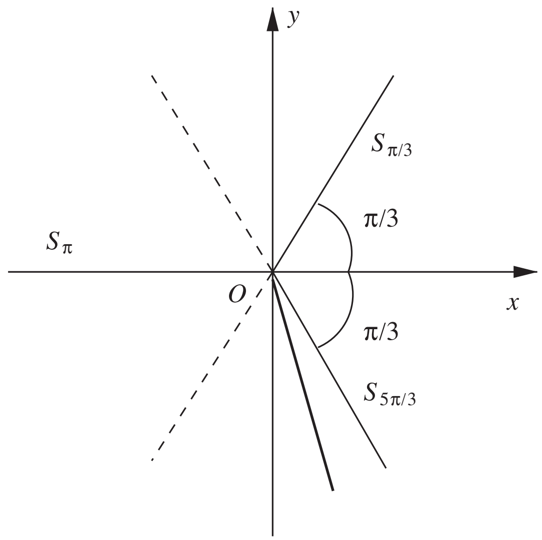



FIG. 12.3 – Lignes de Stokes $S_{\pi/3}$, $S_\pi$ et $S_{5\pi/3}$ (trait plein), anti-Stokes (tirets) et coupure (trait gras).

$z = 0$ par un contour décrit dans le sens trigonométrique, $z$ acquiert un facteur $\exp(-2\mathrm{i}\pi)$ au passage de la coupure et par conséquent

$$k^{-1/2}(z) \to \mathrm{i}k^{-1/2}(z)$$

D'autre part, en ce qui concerne l'exponentielle

$$\int_0^z k(u)\mathrm{d}u \to \mathrm{e}^{-3\mathrm{i}\pi} \int_0^z k(u)\mathrm{d}u = -\int_0^z k(u)\mathrm{d}u$$

Ces deux résultats impliquent qu'après traversée de la coupure, les fonctions $\psi_+$ et $\psi_-$ s'échangent

$$\psi_+(z) \to \mathrm{i}\psi_-(z) \qquad \psi_-(z) \to \mathrm{i}\psi_+(z)$$

Il faut donc que les coefficients $A_+$ et $A_-$ de (12.97) subissent un changement compensateur pour assurer la continuité de $\varphi$

$$A_+ \to -\mathrm{i}A_- \qquad A_- \to -\mathrm{i}A_+ \tag{12.98}$$

Sur chaque ligne de Stokes, le coefficient de l'exponentielle sous-dominante est indéterminé, et il subit un changement proportionnel à celui du terme dominant. Par exemple, au voisinage de la ligne de Stokes $\theta = \pi/3$, et dans un intervalle $\pi/3 - \varepsilon \lesssim \theta \lesssim \pi/3 + \varepsilon$, $A_1$ et $A_2$ (12.82) changent suivant

$$A_1 \to A_1 + \alpha A_2 \qquad A_2 \to A_2$$

où le coefficient $\alpha$ reste à déterminer. Sur la ligne de Stokes $\theta = \pi$, le premier terme de (12.82) est dominant et

$$A_1 + \alpha A_2 \to A_1 + \alpha A_2 \qquad A_2 \to A_2 + \beta(A_1 + \alpha A_2)$$

Sur la ligne de Stokes $\theta = 5\pi/3$, le premier terme de (12.82) est à nouveau dominant. Mais comme la coupure a été traversée, il faut prendre en compte (12.98) et

$$\begin{aligned} A_1 + \alpha A_2 &\to -\mathrm{i}[A_2 + \beta(A_1 + \alpha A_2)] \\ A_2 + \beta(A_1 + \alpha A_2) &\to -\mathrm{i}[A_1 + \alpha A_2 + \gamma(A_2 + \beta[A_1 + \alpha A_2])] \end{aligned} \tag{12.99}$$

L'analyticité de $\varphi(z)$ implique que les coefficients $A_1$ et $A_2$ s'identifient respectivement à la première et à la seconde ligne de (12.99), ce qui permet de déterminer les coefficients $\alpha$, $\beta$ et $\gamma$

$$\alpha = \beta = \gamma = \mathrm{i} \tag{12.100}$$

On en déduit immédiatement la formule de raccordement (12.94). En effet, si l'on veut que $\varphi(z)$ soit exponentiellement décroissante dans la région $x < 0$ (sur la ligne de Stokes $\theta = \pi$), le coefficient de $\psi_+$ doit s'annuler : $A_1 + \mathrm{i}A_2 = 0$, soit

$$A_1 = \frac{1}{2}\, B_1\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4} \qquad A_2 = \frac{1}{2}\, B_1\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4} \tag{12.101}$$

où $B_1$ est défini en (12.81).

### 12.4.4 États liés

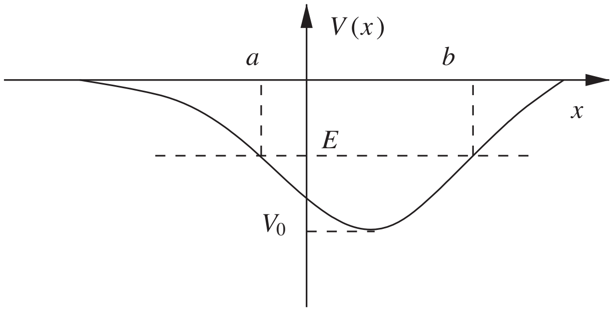



FIG. 12.4 – États liés d'un puits de potentiel.

Cherchons les états liés d'un puits de potentiel avec un minimum unique (figure 12.4) à l'approximation BKW, en appelant $a$ et $b$ les abscisses des points de rebroussement. Nous distinguons trois régions de l'axe des $x$ : I :

$x < a$ ; II : $a < x < b$ ; III : $x > b$. Pour $x \to -\infty$, la fonction d'onde doit être de la forme

$$\varphi(x) = \frac{A}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left[\int_a^x \kappa(u)\,\mathrm{d}u\right] \tag{12.102}$$

tandis que dans la région III

$$\varphi(x) = \frac{B}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left[-\int_b^x \kappa(u)\,\mathrm{d}u\right] \tag{12.103}$$

Dans la région intermédiaire II, la fonction d'onde est d'après (12.94) (raccordement à $x = a$)

$$\frac{2A}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\int_0^x k(u)\,\mathrm{d}u - \frac{\pi}{4}\right]$$

mais d'après (12.95) elle prend aussi la forme (raccordement à $x = b$)

$$\frac{2B}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\int_0^x k(u)\,\mathrm{d}u + \frac{\pi}{4}\right]$$

Écrivons la première forme de $\varphi(x)$ en utilisant

$$\int_a^x k(u)\mathrm{d}u = \int_a^b k(u)\mathrm{d}u + \int_b^x k(u)\mathrm{d}u = \Psi + I(x)$$

où nous avons défini $\Psi$ par

$$\Psi = \int_a^b k(u)\mathrm{d}u \tag{12.104}$$

Les deux formes de $\varphi(x)$ dans la région II ne sont compatibles que si

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\Psi} = -1 \qquad B = -\mathrm{i}A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Psi} \tag{12.105}$$

La première de ces équations donne la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld

$$\Psi = \int_a^b k(u)\,\mathrm{d}u = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \tag{12.106}$$

et la seconde $A = (-1)^n B$. On reconnaît dans $\hbar\Psi$ l'action classique du mouvement sur une demi-période dans le puits. L'équation (12.103) donne les niveaux d'énergie du puits de potentiel à l'approximation BKW. Le facteur $1/2$ ne devrait pas *a priori* être pertinent, car la règle de Bohr-Sommerfeld n'est en principe valable que pour des actions grandes par rapport à $\hbar$, c'est-à-dire pour $n \gg 1$ : il faut donc que le puits ait un nombre d'états liés suffisamment grand. Toutefois, on observe (1) que cette règle devient de plus en plus précise quand $S_{\mathrm{cl}}/\hbar \to \infty$ et que le facteur $1/2$ est crucial pour l'accord avec les

données expérimentales ou numériques, (2) qu'appliquée à l'oscillateur harmonique, elle donne *exactement* les niveaux d'énergie (mais c'est un accident). En effet, le potentiel est $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ et les points de rebroussement sont $x_\pm = \pm\sqrt{2E/m\omega^2}$, ce qui donne pour l'angle $\Psi$

$$\Psi = \int_{x_-}^{x_+} \sqrt{2m - m^2\omega^2 x^2}\, \mathrm{d}x = \frac{E\pi}{\omega}$$

d'où les niveaux d'énergie $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$.

La procédure de quantification semi-classique obtenue en (12.106) s'exprime en fonction de l'action classique $S_{\mathrm{cl}}$ correspondant à un aller-retour de la particule

$$\frac{1}{\hbar}\, S_{\mathrm{cl}} = \frac{1}{\hbar} \oint p\mathrm{d}x = 2\pi \left(n + \frac{\nu}{4}\right)$$

où $\nu$ est *l'indice de Maslov*, et $\nu = 2$ dans (12.106). Cette procédure de quantification peut se généraliser aux systèmes intégrables : pour un tel système, si le nombre de degrés de liberté est $d$, les trajectoires sont situées sur un tore à $d$ dimensions dans l'espace de phase à $2d$ dimensions $\{x_i, p_i\}$, $i = 1, \ldots, d$. Chaque boucle fermée tracée sur le tore donne lieu à une condition de quantification individualisée avec des indices de Maslov $\nu_i$

$$\frac{1}{\hbar} \oint p_i \mathrm{d}x_i = 2\pi \left(n_i + \frac{\nu_i}{4}\right)$$

et les niveaux d'énergie sont caractérisés par les entiers $n_1, \ldots, n_d$ et sont donnés par $H(n_1, \ldots, n_d)$, où $H$ est le hamiltonien.

Pour des systèmes non intégrables, la quantification à la Bohr-Sommerfeld n'est plus possible en l'absence de tores invariants. Néanmoins, grâce en particulier aux travaux de Gutzwiller, on a pu généraliser l'approximation BKW aux systèmes non intégrables en partant d'une approximation semi-classique pour l'intégrale de chemin. Ainsi que nous l'avons déjà noté en introduction à ce chapitre, ces travaux sont techniquement très complexes et nous renvoyons le lecteur aux livres cités en bibliographie, en nous contentant d'écrire la formule d'approximation semi-classique du propagateur dans la région permise classiquement

$$K_{\mathrm{scl}}(x_b, x_a; t) = \left(\frac{\mathrm{i}}{2\pi\hbar}\right)^{d/2} \sum_r |D_r(x_b, x_a)|^{1/2} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\, S_r(x_b, x_a) - \frac{\mathrm{i}\nu_r\pi}{2}\right)$$

où $D_r$ est le déterminant de van Vleck

$$D_r(x_b, x_a) = \det\left(-\frac{\partial^2 S_r(x_b, x_a)}{\partial x_{ai}\, \partial x_{bj}}\right)$$

et $S_r(x_b, x_a)$ est l'action classique pour aller du point $x_a$ au point $x_b$ en un temps $t$ ; la somme sur $r$ porte sur toutes les trajectoires possibles, et les $\nu_r$

sont les indices de Maslov provenant des points de rebroussement en dimension un et plus généralement des caustiques. Un des résultats fondamentaux de ce type d'approche est la formule de trace de Gutzwiller [1990], chapitre 17, qui donne la densité de niveaux en fonction des propriétés des orbites périodiques ; voir aussi Stöckman [1999], chapitre 7.

### 12.4.5 Effet tunnel

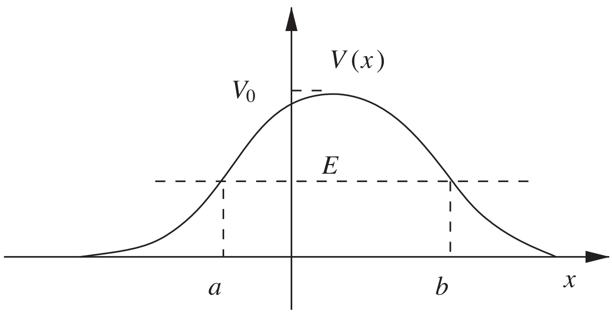



FIG. 12.5 – Barrière de potentiel.

Considérons maintenant un potentiel $V(x)$ s'annulant pour $x \to \pm\infty$, possédant un maximum unique en $x_0$, $V(x_0) = V_0$ (figure 12.5), et une particule d'énergie $0 < E < V_0$. La trajectoire classique possède deux points de rebroussement $a$ et $b$. Supposons que la particule arrive de la région $x \to -\infty$ en se propageant vers la droite. Une particule classique serait renvoyée en $x = a$ par la barrière de potentiel, mais une particule quantique possède une probabilité non nulle de franchir la barrière. En effet, la fonction d'onde ne s'annule pas dans la région $a \le x \le b$, et il est possible de la raccorder à une onde progressive dans la région $x > b$. Le phénomène est analogue à celui d'une onde évanescente en optique : lorsqu'une onde lumineuse arrive d'un milieu d'indice $n_1$ dans un milieu d'indice $n_2$, avec $n_2 < n_1$, il y a réflexion totale pour des angles d'incidence plus grands que l'angle critique $i_0$, donné par $\sin i_0 = n_2/n_1$. Si le milieu d'indice $n_2$ est une lame suffisamment mince, la réflexion n'est pas totale, et il existe une petite probabilité de transmission car l'onde lumineuse ne s'annule pas complètement dans la lame : elle décroît exponentiellement, et elle peut donc se raccorder à une onde progressive dans le milieu d'indice $n_1$.

Les régions classiquement permises sont $x < a$ et $x > b$. Dans la région $x > b$, la fonction d'onde est donnée par (12.82)

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\left(A_1 \exp\left[\mathrm{i}\int_b^x k(u)\,\mathrm{d}u\right] + A_2 \exp\left[-\mathrm{i}\int_b^x k(u)\,\mathrm{d}u\right]\right)$$

et dans la région $x < a$ par

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left( C_1 \exp\left[ \mathrm{i} \int_a^x k(u)\, \mathrm{d}u \right] + C_2 \exp\left[ -\mathrm{i} \int_a^x k(u)\, \mathrm{d}u \right] \right)$$

Dans cette équation, le premier terme $C_1$ représente une onde incidente se propageant vers la droite et arrivant sur la barrière, et le deuxième terme $C_2$ une onde réfléchie. Pour relier le couple $(A_1, A_2)$ au couple $(C_1, C_2)$, on procède comme au § 12.4.3. Il existe trois lignes de Stokes partant du point $x = a$ et trois lignes de Stokes partant de $x = b$ ; le segment de droite qui joint $x = a$ à $x = b$ est une ligne de Stokes commune aux deux points. Deux coupures partent de ces deux points. On trace un contour encerclant *l'ensemble* des deux points en écrivant la loi de transformation des coefficients chaque fois que l'on traverse une ligne de Stokes. Les différents coefficients analogues de $\alpha, \beta, \gamma$ du § 12.4.3 sont déterminés en exigeant la continuité de la fonction d'onde après un tour complet. Le calcul est fastidieux, et le lecteur intéressé pourra consulter Child [1991], appendice A. Le résultat peut s'écrire sous forme matricielle[13]

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1+\mathrm{e}^{2\Psi})^{1/2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} & \mathrm{i}\mathrm{e}^{\Psi} \\ -\mathrm{i}\mathrm{e}^{\Psi} & (1+\mathrm{e}^{2\Psi})^{1/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \tag{12.107}$$

avec

$$\Psi = \int_a^b \kappa(u)\, \mathrm{d}u = -\pi\delta \tag{12.108}$$

La phase $\phi$ qui intervient dans (12.107) vaut

$$\phi = \arg\Gamma\left(\frac{1}{2} + \mathrm{i}\delta\right) - \delta \ln|\delta| + \delta$$

où $\Gamma$ est la fonction factorielle. Pour appliquer (12.107) à l'effet tunnel où il existe seulement une onde se propageant vers la droite dans la région $x > b$, on choisit $A_2 = 0$. Comme la normalisation de l'onde incidente dans la région $x < a$ est arbitraire, on peut prendre $C_1 = 1$, ce qui donne alors

$$C_2 = -\mathrm{i}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\, \mathrm{e}^{\Psi} (1+\mathrm{e}^{2\Psi})^{-1/2}$$

et

$$A_1 = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\, (1+\mathrm{e}^{2\Psi})^{-1/2}$$

Ces équations donnent le coefficient de réflexion $R$

$$R = |C_2|^2 = \frac{1}{(1+\mathrm{e}^{-2\Psi})}$$

13. En fait, la phase $\phi$ n'est pas fixée par la procédure, et il est nécessaire de recourir à un argument indépendant. Cependant, les coefficients de réflexion et de transmission sont indépendants de $\phi$.

et le coefficient de transmission $T$ à travers la barrière

$$\boxed{T = |A_1|^2 = \frac{1}{(1+\mathrm{e}^{2\Psi})} \simeq \mathrm{e}^{-2\Psi} = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m[E-V(x)]}\,\mathrm{d}x\right]} \tag{12.109}$$

On remarque que la somme du coefficient de transmission et du coefficient de réflexion est égale à l'unité, $T + R = 1$.

L'effet tunnel a de nombreuses applications en physique quantique. Nous nous contenterons d'en examiner deux : la radioactivité $\alpha$ et le microscope à effet tunnel. La radioactivité $\alpha$ est la désintégration d'un noyau avec émission d'une particule $\alpha$, c'est-à-dire un noyau d'$^4$He. En appelant $Z$ et $N$, les nombres de protons et de neutrons dans le noyau initial $(A = Z + N)$ (en général $Z \gtrsim 80$), la réaction nucléaire de désintégration $\alpha$ s'écrit

$$(Z, N) \to (Z-2, N-2) + {}^4\mathrm{He}$$

Un exemple est la désintégration du polonium en plomb

$${}^{214}\mathrm{Po}_{84} \to {}^{210}\mathrm{Pb}_{82} + {}^4\mathrm{He}_2 + 7.8 \text{ MeV}$$

Dans une théorie approchée de la radioactivité $\alpha$, on admet que la particule $\alpha$ préexiste dans le noyau initial et on se ramène pour simplifier au cas à une dimension. Si $R \simeq 1.2 \times A^{1/3} \simeq 7\,\mathrm{fm}$ est le rayon du noyau, la particule $\alpha$ sera soumise au potentiel nucléaire et au potentiel coulombien répulsif entre le noyau d'$^4$He de charge 2 (en unités de la charge du proton) et le noyau final de charge $(Z-2)$ en supposant la distribution de charge à symétrie sphérique. Si $r$ est la distance entre le noyau d'hélium et le noyau final, nous aurons pour $r > R$

$$V_{\mathrm{Cb}}(r) = \frac{2(Z-2)e^2}{r^2}$$

Lorsque $r < R$, les forces nucléaires attractives l'emportent largement sur les forces coulombiennes que l'on peut alors négliger. On aboutit ainsi à un potentiel représenté schématiquement sur la figure 12.6. Il existe donc une barrière de potentiel qui empêcherait la particule $\alpha$ de sortir du noyau si son mouvement était régi par la physique classique. C'est l'effet tunnel qui permet à la particule $\alpha$ de sortir du noyau. Le raisonnement précédent permet en théorie d'estimer la vie moyenne du noyau initial, mais les approximations que nous avons faites sont très grossières et l'effet tunnel très sensible aux détails : bien que la physique sous-jacente soit indubitablement correcte, il ne faut pas s'attendre à des résultats en accord quantitatif avec l'expérience. Le phénomène inverse de la désintégration radioactive intervient dans les réactions de fusion, par exemple la réaction déjà mentionnée au § 1.1.2

$${}^2\mathrm{H} + {}^3\mathrm{H} \to {}^4\mathrm{He} + n + 17.6 \text{ MeV}$$

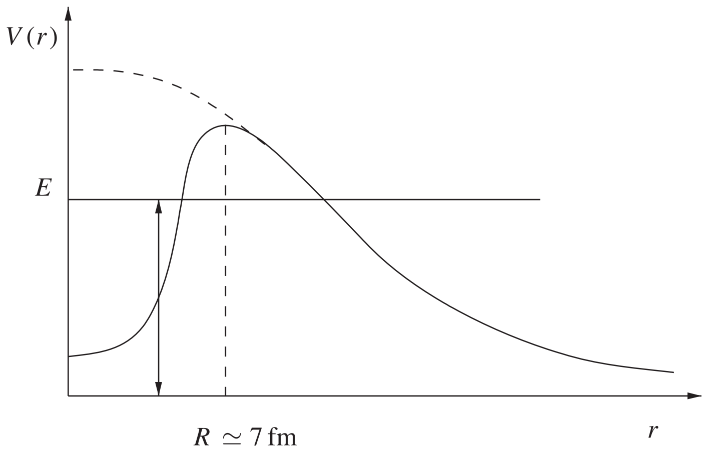



Fig. 12.6 – Barrière de potentiel de la radioactivité $\alpha$.

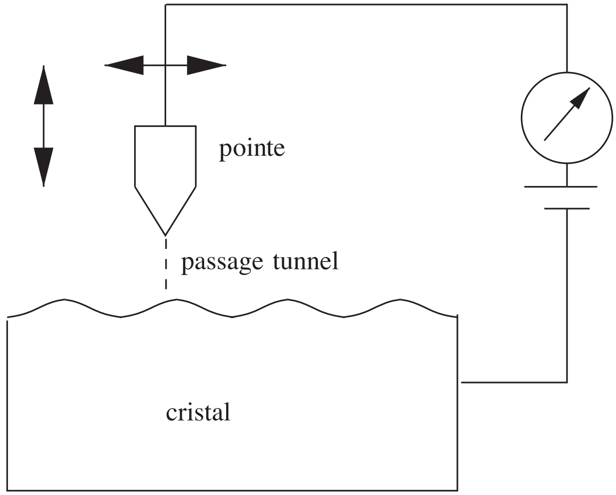



Fig. 12.7 – Principe du microscope à effet tunnel. On déplace une pointe au voisinage de la surface d'un cristal et on ajuste la distance de façon que le courant soit constant. Ceci donne une cartographie de la distribution électronique sur la surface.

qui fait également appel à l'effet tunnel et est examinée à l'exercice 13.6.1, où l'on donne un exemple d'évaluation de (12.109).

Une application très importante de l'effet tunnel est le microscope à effet tunnel. Dans un microscope à effet tunnel, on déplace une pointe très fine près de la surface d'un échantillon conducteur (figure 12.7). Les électrons peuvent passer par effet tunnel de la pointe à l'échantillon, ce qui produit un

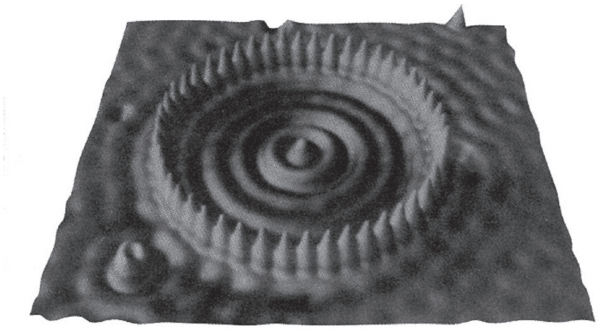


FIG. 12.8 – Dépôt d'atomes par microscope à effet tunnel. Des atomes de fer (les pics) sont disposés en cercle sur un substrat de cuivre et forment des états résonants électroniques (les vagues) sur la surface du cuivre. D'après un cliché IBM.

courant *macroscopique*, dépendant de façon très sensible de la distance entre la pointe et l'échantillon, en raison de la dépendance exponentielle (12.109) par rapport à la distance. Cela permet de réaliser une cartographie très précise de la surface de l'échantillon, avec une résolution de $\simeq 0.01\,\mathrm{nm}$. Une extension de cette technique permet de manipuler des atomes et des molécules déposées sur un substrat (figure 12.8).

## 12.5 Mécanique quantique dans l'espace de phase

### 12.5.1 Conditions pour une représentation dans l'espace de phase

En physique statistique, étant donné un système classique décrit par ses coordonnées canoniques $(q_1, \ldots, q_n; p_1, \ldots, p_n) \equiv (q, p)$, on définit une densité de probabilité $\rho_{\rm cl}(q, p; t)$ qui donne la probabilité $\rho_{\rm cl}(q, p; t)\mathrm{d}q\mathrm{d}p$ de trouver au temps $t$ le système dans un volume infinitésimal $\mathrm{d}q\mathrm{d}p$ de l'espace de phase autour du point $(q, p)$. Cette densité de probabilité doit être positive : $\rho_{\rm cl}(q, p; t) \geq 0$ et normalisée à l'unité

$$\int \rho_{\rm cl}(q, p; t)\,\mathrm{d}q\,\mathrm{d}p = 1 \tag{12.110}$$

Les intégrales sur $p$ et $q$ donnent les densités de probabilité $\rho_{\rm cl}(q; t)$ et $\rho_{\rm cl}(p; t)$

$$\begin{aligned} \rho_{\rm cl}(q; t) &= \int \rho_{\rm cl}(q, p; t)\,\mathrm{d}p \\ \rho_{\rm cl}(p; t) &= \int \rho_{\rm cl}(q, p; t)\,\mathrm{d}q \end{aligned} \tag{12.111}$$

Il ne suffit évidemment pas de connaître $\rho_{\rm cl}(q;t)$ et $\rho_{\rm cl}(q;t)$, car c'est la distribution jointe $\rho_{\rm cl}(q,p;t)$ qui décrit les corrélations entre $q$ et $p$. Un exemple de densité $\rho_{\rm cl}$ est donné par la distribution canonique d'équilibre (indépendante du temps)

$$\rho_{\rm cl}(q,p) = \frac{1}{Z}\,{\rm e}^{-\beta H_{\rm cl}(q,p)} \qquad\qquad Z = \int {\rm d}q{\rm d}p\,{\rm e}^{-\beta H_{\rm cl}(q,p)}$$

où $H_{\rm cl}$ est le hamiltonien classique, $H_{\rm cl} = K + V$, et la distribution de probabilité se factorise dans ce cas particulier

$$\rho_{\rm cl}(q,p) = \rho_{\rm cl}(q)\rho_{\rm cl}(p)$$

Si une propriété physique $A_{\rm cl}$ est fonction des coordonnées $q$ et $p$, la valeur moyenne de $A_{\rm cl}$ est

$$\langle A_{\rm cl}\rangle(t) = \int {\rm d}q\,{\rm d}p\,\rho_{\rm cl}(q,p;t)A_{\rm cl}(q,p) \tag{12.112}$$

On peut se demander s'il existe pour un système quantique décrit par un opérateur statistique $\rho(t)$ l'analogue d'une distribution de probabilité dans l'espace de phase, $\rho_Q(q,p;t)$. En fait, il existe une infinité de solutions $\rho_Q(q,p;t)$ obéissant à (12.110) et (12.111), mais elles dépendent de la préparation de l'opérateur statistique (§ 11.1.4), et pas uniquement de $\rho(t)$, sauf bien entendu si $\rho(t)$ représente un cas pur, puisque dans ce cas cette préparation de $\rho(t)$ est unique. Il n'existe pas de densité de probabilité $\rho_Q(q,p;t)$ ayant toutes les propriétés souhaitées, et la fonction la plus utile en pratique est la *distribution de Wigner* $\rho_{\rm W}(q,p;t) \equiv w(q,p;t)$, aussi appelée *représentation de Wigner* (de l'opérateur statistique) qui obéit à (12.110) et (12.111), mais n'est pas en général uniformément positive : à strictement parler, on ne peut pas l'interpréter comme une distribution de probabilité. Une autre distribution utile est la distribution de Husimi $\rho_{\rm H}(q,p;t)$, qui est positive mais n'obéit pas à (12.111). Nous traiterons uniquement le cas de la distribution de Wigner et renvoyons le lecteur aux références pour celle de Husimi.

## 12.5.2 La distribution de Wigner

Revenons au cas simple d'une particule quantique se déplaçant sur l'axe $Ox$, $q \to x, p \to p$, la généralisation à un ensemble de coordonnées $(q,p)$ étant évidente. Soit $\rho(t)$, l'opérateur statistique de la particule

$$\rho(t) = \sum_\alpha \mathsf{p}_\alpha |\varphi_\alpha(t)\rangle\langle\varphi_\alpha(t)| \tag{12.113}$$

où les vecteurs $|\varphi_\alpha\rangle$ sont normalisés, $\langle\varphi_\alpha|\varphi_\alpha\rangle = 1$, mais pas nécessairement orthogonaux. Les éléments diagonaux dans la représentation $x$, $\langle x|\rho(t)|x\rangle$

donnent la densité de probabilité de présence en position ($\varphi_\alpha(x;t) = \langle x|\varphi_\alpha(t)\rangle$)

$$\langle x|\rho(t)|x\rangle = \sum_\alpha \mathsf{p}_\alpha |\varphi_\alpha(x;t)|^2 \tag{12.114}$$

étant donné que $|\varphi_\alpha(x;t)|^2$ est la probabilité de présence dans l'état $|\varphi_\alpha(t)\rangle$. La distribution de probabilité en impulsion est bien sûr donnée par les éléments de matrice diagonaux de $\rho(t)$ dans la représentation $p$, $\langle p|\rho(t)|p\rangle$

$$\langle p|\rho(t)|p\rangle = \sum_\alpha \mathsf{p}_\alpha |\tilde{\varphi}_\alpha(p;t)|^2 \tag{12.115}$$

où $\tilde{\varphi}_\alpha(p;t)$ est la transformée de Fourier de $\varphi_\alpha(x;t)$. Ces éléments de matrice diagonaux sont manifestement positifs

$$\langle x|\rho(t)|x\rangle \geq 0 \qquad \langle p|\rho(t)|p\rangle \geq 0$$

et peuvent être interprétés comme des densités de probabilité de position ou d'impulsion, ce qui généralise les résultats de la section 8.1.

La *distribution de Wigner* $w(x,p;t)$ est définie par

$$\boxed{w(x,p;t) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}py/\hbar}\,\langle x+\frac{y}{2}|\rho(t)|x-\frac{y}{2}\rangle \mathrm{d}y} \tag{12.116}$$

Sous cette forme, la symétrie entre $x$ et $p$ ne saute pas aux yeux, mais il est facile de la retrouver en écrivant (noter que dans les équations qui suivent, $k$ est une impulsion)

$$|x-\frac{y}{2}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k\,|k\rangle\langle k|x-\frac{y}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-y/2)/\hbar}|k\rangle$$

et une formule analogue pour $\langle x+y/2|$. La distribution $w(x,p;t)$ se transforme en

$$w(x,p;t) = \int \frac{\mathrm{d}k\mathrm{d}k'\mathrm{d}y}{(2\pi\hbar)^2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'(x+y/2)/\hbar}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-y/2)/\hbar}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}py/\hbar}\,\langle k'|\rho(t)|k\rangle$$

L'intégrale sur $y$ donne un facteur $2\pi\hbar\delta[p-(k+k')/2]$, ce qui permet d'intégrer sur $k'$

$$w(x,p;t) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^2}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}(p-k)x/\hbar}\langle 2p-k|\rho(t)|k\rangle$$

Un changement de variable $p-k = z/2$ donne la forme symétrique de (12.116) dans l'échange ($x \leftrightarrow p$)

$$w(x,p;t) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}xz/\hbar}\,\langle p+\frac{z}{2}|\rho(t)|p-\frac{z}{2}\rangle \mathrm{d}z \tag{12.117}$$

Il est immédiat de vérifier la validité de (12.111), par exemple

$$\int \mathrm{d}p\, w(x,p;t) = \int \mathrm{d}y\, \delta(y) \langle x + \frac{y}{2}|\rho(t)|x - \frac{y}{2}\rangle = \langle x|\rho(t)|x\rangle \qquad (12.118)$$

L'hermiticité de $\rho$, $\rho = \rho^\dagger$, assure que $w$ est réel, mais ne garantit en rien sa positivité, tandis que $\mathrm{Tr}\rho = 1$ assure la normalisation

$$\int \mathrm{d}x\mathrm{d}p\, w(x,p;t) = 1$$

On définit la représentation de Wigner d'une propriété physique $A$ (supposée indépendante du temps pour simplifier) par analogie avec (12.116)

$$A(x,p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}py/\hbar} \langle x + \frac{y}{2}|A|x - \frac{y}{2}\rangle \mathrm{d}y \qquad (12.119)$$

Cette expression permet d'évaluer la valeur moyenne de $A$, $\langle A\rangle(t)$ dans l'état $\rho(t)$, en partant de

$$\langle A\rangle(t) = \mathrm{Tr}\left[\rho(t)A\right] = \int \mathrm{d}x\mathrm{d}x' \langle x|\rho(t)|x'\rangle\langle x'|A|x\rangle$$

On exprime $\langle x|\rho(t)|x'\rangle$ grâce à la transformée de Fourier inverse de (12.116)

$$\langle x + \frac{y}{2}|\rho(t)|x - \frac{y}{2}\rangle = \int \mathrm{d}p\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}py/\hbar}\, w(x,p;t)$$

et on procède de même pour $\langle x'|A|x\rangle$. On obtient finalement

$$\langle A\rangle(t) = \int \mathrm{d}x\mathrm{d}p\, w(x,p;t)A(x,p) \qquad (12.120)$$

Cette formule rappelle bien évidemment celle de l'espace de phase classique (12.112), et c'est cette expression qui donne à la représentation de Wigner son intérêt particulier. Toutefois, il ne faut pas pousser l'analogie trop loin et garder à l'esprit le fait que $w$ n'est pas uniformément positif. Le carré de $w$ vérifie une inégalité intéressante (exercice 12.7.8)

$$\int \mathrm{d}x\mathrm{d}p\, w^2(x,p;t) \le \frac{1}{2\pi\hbar} \qquad (12.121)$$

qui montre que $w$ ne peut pas être trop piquée.

À partir de l'équation d'évolution (11.33) de l'opérateur statistique, on peut obtenir l'évolution temporelle de la distribution de Wigner. Celle-ci prend la forme peu intuitive (exercice 12.7.9)

$$\begin{aligned}\partial_t w(x,p;t) = &-\frac{p}{m}\,\partial_x w(x,p;t) \\ &+\frac{\mathrm{i}}{2\pi\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}py/\hbar}\,\langle x+\frac{y}{2}|\rho(t)|x-\frac{y}{2}\rangle \left[V\Big(x-\frac{y}{2}\Big)-V\Big(x+\frac{y}{2}\Big)\right]\end{aligned} \qquad (12.122)$$

Le résultat se simplifie dans le cas de l'oscillateur harmonique

$$V\left(x-\frac{y}{2}\right)-V\left(x+\frac{y}{2}\right)=-m\omega^2 xy$$

et l'on trouve dans ce cas l'équation de Liouville exprimant la conservation de la probabilité

$$\frac{\partial w}{\partial t}=-\frac{p}{m}\frac{\partial w}{\partial x}+m\omega^2 x\frac{\partial w}{\partial p} \tag{12.123}$$

### 12.5.3 Distribution de Wigner pour les états purs

Lorsque $\rho$ représente un état pur $\varphi(x,t)$, la distribution de Wigner est

$$w_{\rm pur}(x,p;t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\varphi\left(x+\frac{y}{2};t\right)\varphi^*\left(x-\frac{y}{2};t\right)\,{\rm e}^{-{\rm i}py/\hbar}\,{\rm d}y \tag{12.124}$$

et l'inégalité (12.121) se transforme en l'égalité

$$\int {\rm d}x{\rm d}p\,w^2_{\rm pur}(x,p;t)=\frac{1}{2\pi\hbar} \tag{12.125}$$

que l'on montre à partir de $\operatorname{Tr}\rho^2=1$ (exercice 12.7.8).

Donnons enfin deux exemples de distribution de Wigner pour des états purs. Le premier exemple est celui du paquet d'ondes gaussien

$$\varphi(x)=\left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \tag{12.126}$$

Un calcul classique de transformée de Fourier de gaussienne donne

$$w(x,p)=\frac{1}{\pi\hbar}\exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right)\exp\left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2}\right) \tag{12.127}$$

Dans ce cas, la distribution de Wigner est partout positive, et on peut montrer que la distribution de Wigner est uniformément positive si et seulement si c'est celle d'un paquet d'ondes gaussien. Un exemple plus intéressant est celui de la superposition de deux paquets d'onde gaussiens

$$\varphi(x)\simeq\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4}\left(\exp\Big[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\Big]+\exp\Big[-\frac{(x+a)^2}{2\sigma^2}\Big]\right). \tag{12.128}$$

avec $a\gg\sigma$, de sorte que le recouvrement des deux paquets est négligeable, et le facteur $1/\sqrt{2}$ assure la normalisation approchée de la fonction d'onde. On trouve pour la distribution de Wigner

$$\begin{aligned}w(x,p)=\frac{1}{2\sqrt{2}\pi\hbar}\,\exp\left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2}\right)\Bigg[&\exp\Big[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\Big]+\exp\Big[-\frac{(x+a)^2}{2\sigma^2}\Big]\\ &+2\exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right)\cos\left(\frac{2ap}{\hbar}\right)\Bigg]\end{aligned} \tag{12.129}$$

Le dernier terme est oscillant, et on voit que la distribution $w$ peut devenir négative. Le terme oscillant subsiste même si $a \gg \sigma$, ce qui montre le caractère non classique de la distribution. Comme nous le verrons au chapitre 18, ce terme décroît rapidement en fonction du temps en raison de la décohérence si la fonction d'onde (12.129) est celle d'une particule mésoscopique interagissant avec un milieu extérieur.

## 12.6 Théorème adiabatique et phases géométriques

### 12.6.1 Un exemple

Reprenons l'étude du spin 1/2 dans un champ magnétique (section 5.2), en choisissant la même forme du champ

$$\vec{B} = B_0 \hat{z} + B_1(\hat{x}\cos\omega t - \hat{y}\sin\omega t) \tag{12.130}$$

La fréquence de Larmor est $\omega_0 = \gamma B_0$, celle de Rabi $\omega_1 = \gamma B_1$, et le hamiltonien s'écrit

$$H(t) = -\frac{1}{2}\,\hbar\omega_0\sigma_z - \frac{1}{2}\,\hbar\omega_1(\sigma_x\cos\omega t - \sigma_y\sin\omega t) \tag{12.131}$$

Soit $|\psi(t)\rangle$, le vecteur d'état du spin dans le référentiel du laboratoire et $|\hat{\psi}(t)\rangle$, le vecteur d'état dans le référentiel tournant (*cf.* (5.28))

$$|\hat{\psi}(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t\sigma_z/2}\,|\psi(t)\rangle$$

Nous avons montré dans la section 5.2 que le hamiltonien $\hat{H}$ qui régit l'évolution dans le référentiel tournant était indépendant du temps (*cf.* (5.34))

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\,\hbar\delta\sigma_z - \frac{1}{2}\,\hbar\omega_1\sigma_x \tag{12.132}$$

où $\delta = \omega - \omega_0$ est le désaccord. L'évolution temporelle de $|\psi(t)\rangle$ est donc

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t\sigma_z/2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\,|\psi(0)\rangle \tag{12.133}$$

si l'on identifie $|\psi(t)\rangle$ et $|\hat{\psi}(t)\rangle$ au temps $t = 0$ : $|\psi(0)\rangle = |\hat{\psi}(0)\rangle$.

À un instant $t$, le champ magnétique est dirigé suivant une direction $\hat{n}(t)$ repérée par un angle polaire $\theta$ et un angle azimutal qui dépend du temps, $\phi(t) = -\omega t$. La valeur absolue de $\vec{B}$ est indépendante de $t$

$$\gamma B = \gamma\sqrt{B_0^2 + B_1^2} = \overline{\omega}$$

avec

$$\overline{\omega} = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \tag{12.134}$$

L'angle polaire $\theta$ vérifie donc

$$\omega_0 = \overline{\omega}\cos\theta \qquad \omega_1 = \overline{\omega}\sin\theta \tag{12.135}$$

*À un instant donné*, les vecteurs propres du hamiltonien $H(t)$ sont ceux (3.56) de $\vec{\sigma}\cdot\hat{n}(t)$, et ils dépendent donc de $\phi(t)$

$$|\psi_+(\phi(t))\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(t)} \end{pmatrix} \qquad |\psi_-(\phi(t))\rangle = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(t)} \end{pmatrix} \tag{12.136}$$

Les vecteurs propres $|\psi_\pm(\phi(t))\rangle \equiv |\psi_\pm(t)\rangle$ correspondent aux valeurs propres de l'énergie $E_\pm(\phi(t)) = \mp\hbar\overline{\omega}/2$ d'un spin 1/2 dans un champ magnétique $\vec{B}$ orienté suivant la direction $\hat{n}$ et tel que $\gamma B = \overline{\omega}$. Ces valeurs propres sont indépendantes du temps (mais pas les vecteurs propres correspondants !). Supposons qu'au temps $t = 0$, le spin soit dans l'état $|\psi_-\rangle$ : $|\psi(0)\rangle = |\psi_-(0)\rangle$. On obtient $|\psi(t)\rangle$ dans la base $|\pm\rangle$ des états propres de $\sigma_z$ en combinant (5.42) et (12.133). Exprimant $|\pm\rangle$ en fonction de $|\psi_\pm(t)\rangle$

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}\,|\psi_+(t)\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,|\psi_-(t)\rangle \\ |-\rangle &= \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi(t)}\,|\psi_+(t)\rangle - \cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi(t)}\,|\psi_-(t)\rangle \end{aligned} \tag{12.137}$$

on écrit $|\psi(t)\rangle$ en fonction de $|\psi_\pm(t)\rangle$ grâce à (5.42)

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(t)/2}|\psi(t)\rangle = &-\mathrm{i}\frac{\omega}{\Omega}\,\sin\frac{\Omega t}{2}\,\sin\theta\,|\psi_+(t)\rangle \\ &+\left[\cos\frac{\Omega t}{2} + \frac{\mathrm{i}}{\Omega}\,(\omega\cos\theta - \overline{\omega})\sin\frac{\Omega t}{2}\right]|\psi_-(t)\rangle \end{aligned} \tag{12.138}$$

avec $\Omega = \sqrt{\omega_1^2 + \delta^2}$. Lorsque $\omega/\Omega \sim 1$, le spin oscille[14] entre les états $|\psi_+(t)\rangle$ et $|\psi_-(t)\rangle$, mais lorsque $\omega/\Omega \ll 1$, la probabilité de le trouver dans l'état $|\psi_+(t)\rangle$ est $\propto (\omega/\Omega)^2$. Ceci donne un exemple du *théorème adiabatique*, examiné dans la sous-section suivante : si le hamiltonien varie lentement en fonction du temps, le spin reste dans l'état propre *instantané* $|\psi_-(t)\rangle$ de $H(t)$. En d'autres termes, le spin suit adiabatiquement le mouvement du champ $\vec{B}$ : le vecteur de Bloch reste orienté en permanence dans la direction $-\hat{n}$ antiparallèle à $\vec{B}$.

Examinons de plus près le cas intéressant $\omega \ll \Omega$, qui corrrespond à une précession de Larmor très rapide par rapport au temps caractéristique d'évolution de $\vec{B}$, en écrivant

$$\Omega = \sqrt{\omega_1^2 + \delta^2} = \sqrt{\overline{\omega}^2 + \omega^2 - 2\omega\overline{\omega}\cos\theta} \simeq \overline{\omega} - \omega\cos\theta$$

14. Il faut éviter toute confusion avec la situation de la section 5.2 : dans cette section, nous nous intéressions aux oscillations (de Rabi) entre les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$, alors que nous étudions ici les oscillations entre les états $|\psi_+(t)\rangle$ et $|\psi_-(t)\rangle$.

Dans ces conditions,

$$|\psi(t)\rangle \simeq \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t/2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t/2}|\psi_-(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\overline{\omega} t/2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(1+\cos\theta)t/2}|\psi_-(t)\rangle \tag{12.139}$$

Le facteur $\exp(-\mathrm{i}\overline{\omega}t/2)$ est un facteur trivial qui correspond tout simplement à l'évolution temporelle régie par la valeur $E_- = \hbar\overline{\omega}/2$ de l'énergie de $|\psi_-\rangle$, et le second facteur de phase est $\exp[\mathrm{i}\,\overline{\gamma}(t)]$, avec

$$\overline{\gamma}(t) = \frac{\omega t}{2}\,(1+\cos\theta) \tag{12.140}$$

Après un tour complet, $t = 2\pi/\omega$, ce facteur de phase est $\exp(\mathrm{i}\gamma)$, où $\gamma$ est la *phase de Berry*

$$\boxed{\gamma = \pi(1+\cos\theta)} \tag{12.141}$$

Le point remarquable est que la phase $\gamma$ ne dépend pas de $\omega$, pourvu que la condition de validité de l'approximation adiabatique, $\omega/\Omega \ll 1$, soit satisfaite. Pour cette raison, la phase de Berry est aussi appelée *phase géométrique.* On peut généraliser ce résultat et montrer que (12.141) reste valable même si $\omega$ dépend du temps, pourvu que $\dot{\omega}/\omega^2 \ll 1$, c'est-à-dire si $\omega(t)$ ne varie pas trop vite. Cependant, on ne peut plus écrire dans ce cas de solution exacte, car le hamiltonien $\hat{H}$ (12.132) dépend alors du temps par l'intermédiaire de $\delta(t)$. Une autre observation est que $\gamma$ dans (12.141) est le demi-angle solide sous lequel est vu le circuit tracé par l'extrémité de $\vec{B}$ : voir l'exercice 12.7.11.

Aharonov et Anandan (Anandan [1992]) ont donné une interprétation intrinsèque de cet effet : au lieu de relier la phase de Berry au fait que le spin suit adiabatiquement le champ, ils interprètent cette phase comme provenant du transport parallèle du vecteur d'état de spin le long d'un trajet tracé sur la sphère de Poincaré-Bloch, c'est-à-dire dans l'espace de Hilbert projectif du spin. Ce transport parallèle définit une connexion, et la phase de Berry est reliée à l'intégrale de cette connexion le long du trajet fermé (contour) suivi par l'extrémité du vecteur de Bloch. Cette intégrale est donnée par la moitié de l'aire sur la sphère limitée par le contour, ou, ce qui revient au même, par la moitié de l'angle solide d'où le contour est vu depuis l'origine. Dans cette interpétation, il n'est pas nécessaire de faire appel à l'adiabadicité.

## 12.6.2 Théorème adiabatique

Nous allons généraliser les résultats de la sous-section précédente en montrant d'abord le théorème adiabatique. Soit un hamiltonien dépendant du temps $H(t)$, ou plus précisément un hamiltonien fonction de paramètres $R_i(t)$ dépendant du temps, notés collectivement $R(t)$. Nous allons montrer que si l'évolution temporelle de $R(t)$ est suffisamment lente, et si le système est initialement dans l'état propre $|\varphi_m(t=0)\rangle$ de $H(t=0)$

$$H(t=0)|\varphi_m(t=0)\rangle = E_m(t=0)|\varphi_m(t=0)\rangle \tag{12.142}$$

alors, il se trouve au temps $t$ dans l'état $|\varphi_m(t)\rangle$ vecteur propre instantané de $H(t)$

$$H(t)|\varphi_m(t)\rangle = E_m(t)|\varphi_m(t)\rangle \tag{12.143}$$

qui se déduit continûment de $|\varphi_m(t=0)\rangle$. Afin de simplifier la démonstration, nous supposons que le spectre de $H(t)$ est discret et non dégénéré, de sorte que l'ensemble $\{|\varphi_m(t)\rangle\}$ forme une base de l'espace de Hilbert des états, et qu'il n'y a aucun croisement de niveaux quand $t$ varie[15]. Les fréquences caractéristiques sont les fréquences de Bohr $\omega_{km}(t) = [E_k(t) - E_m(t)]/\hbar$, et ces fréquences ne sont jamais nulles d'après nos hypothèses : elles sont toutes plus grandes que $\omega_{\rm min}$. Si le temps caractéristique d'évolution de $R(t)$ est $t_{\rm car}$, nous verrons que la condition de validité du théorème adiabatique est

$$t_{\rm car}^{-1} \sim \frac{\dot{R}}{R} \ll \omega_{\rm min} \tag{12.144}$$

Dans le § 12.6.1, $\dot{R}/R = \omega$ et $\omega_{\rm min} = \overline{\omega}$. Les solutions $|\varphi(t)\rangle$ de l'équation de Schrödinger dépendant du temps (8.55) vérifient

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\varphi(t)\rangle = H(t)|\varphi(t)\rangle \tag{12.145}$$

et nous pouvons décomposer $|\varphi(t)\rangle$ dans la base $\{|\varphi_n(t)\rangle\}$

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\, \exp[-\mathrm{i}\alpha_n(t)]\, |\varphi_n(t)\rangle \tag{12.146}$$

Le facteur de phase $\exp[-\mathrm{i}\alpha_n(t)]$ est appelé facteur de phase dynamique : il généralise le facteur $\exp[-\mathrm{i}E_n t/\hbar]$ du cas indépendant du temps et $\exp(-\mathrm{i}\overline{\omega}t/2)$ du § 12.6.1

$$\alpha_n(t) = \frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\,\mathrm{d}t' \tag{12.147}$$

La substitution de (12.146)–(12.147) dans l'équation de Schrödinger (12.145), jointe à (12.143), conduit à

$$\sum_n \Big(\dot{c}_n\, \exp[-\mathrm{i}\alpha_n]\, |\varphi_n(t)\rangle + c_n\, \exp[-\mathrm{i}\alpha_n]\, |\dot{\varphi}_n(t)\rangle\Big) = 0$$

Multiplions cette équation à gauche par le bra $\langle\varphi_k(t)|$ ; compte tenu de $\langle\varphi_k(t)|\varphi_n(t)\rangle = \delta_{nk}$, nous obtenons

$$\dot{c}_k = -\sum_n c_n \exp[-\mathrm{i}(\alpha_n - \alpha_k)]\, \langle\varphi_k|\dot{\varphi}_n\rangle \tag{12.148}$$

Utilisons ensuite la dérivée par rapport au temps de (12.143)

$$\dot{H}|\varphi_n\rangle + H|\dot{\varphi}_n\rangle = \dot{E}_n|\varphi_n\rangle + E_n|\dot{\varphi}_n\rangle$$

15. Voir Messiah [1959], chapitre XVII, pour une discussion générale des conditions de validité du théorème adiabatique.

soit

$$\langle\varphi_k|\dot\varphi_n\rangle(E_n - E_k) = \langle\varphi_k|\dot H|\varphi_n\rangle$$

pour en déduire un résultat exact donnant $\dot c_k$ sous la forme

$$\dot c_k = -c_k\langle\varphi_k|\dot\varphi_k\rangle + \sum_{n\neq k} c_n\,\exp[-\mathrm{i}(\alpha_n - \alpha_k)]\,\frac{\langle\varphi_k|\dot H|\varphi_n\rangle}{E_k - E_n} \tag{12.149}$$

Nous supposons maintenant que le système est au temps $t = 0$ dans l'état $|\varphi_m(t = 0)\rangle$. Si l'approximation adiabatique est valable, nous devons avoir $|c_m(t)| \simeq 1$ et $|c_n(t)| \ll 1$ pour $n \neq m$. De (12.149), on déduit alors ($k \neq m$)

$$\dot c_k = \frac{c_m(t)}{\hbar}\,\exp[-\mathrm{i}(\alpha_m(t) - \alpha_k(t)]\,\frac{\langle\varphi_k(t)|\dot H(t)|\varphi_m(t)\rangle}{\omega_{km}(t)} \tag{12.150}$$

Afin d'étudier la limite à grand temps de $c_k(t)$, nous posons $t = sT$, $0 \le s \le 1$, ce qui permet de transformer (12.150) en

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\,c_k(s) = F(s)\exp\left[\mathrm{i}T\int_0^s \mathrm{d}s'\,\omega_{km}(s')\right] = F(s)\exp\left[\mathrm{i}T\Omega_{km}(s)\right] \tag{12.151}$$

où

$$F(s) = \frac{c_m(s)}{\hbar}\,\frac{\langle\varphi_k|\dot H(s)|\varphi_n\rangle}{\omega_{km}(s)} \qquad\qquad \Omega_{km}(s) = \int_0^s \mathrm{d}s'\,\omega_{km}(s')$$

Intégrons l'équation différentielle (12.151) avec la condition initiale $c_k(0) = 0$, $k \neq m$

$$c_k(s) = \int_0^s \mathrm{d}s'\,F(s')\,\exp\left[\mathrm{i}T\Omega_{km}(s')\right] \tag{12.152}$$

Compte tenu de la condition de non croisement des niveaux, $\Omega_{km}(s)$ est une fonction monotone de $s$ et la phase dans (12.152) n'est jamais stationnaire. Comme $F(s)$ est une fonction continue, l'intégrale tend vers zéro pour $T \to \infty$. Pour le voir explicitement, intégrons (12.152) par parties

$$c_k(s) = \frac{1}{\mathrm{i}T}\left[\left.\frac{F(s')}{\omega_{km}(s')}\right|_0^s - \int_0^s \exp\left[\mathrm{i}T\Omega_{km}(s')\right]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s'}\left(\frac{F(s')}{\omega_{km}(s')}\right)\right]$$

Comme $\mathrm{d}[F(s)/\omega_{km}(s)]$ est une fonction continue de $s$, le terme en facteur de $1/\mathrm{i}T$ reste fini pour $T \to \infty$ et $c_k(s)$ tend vers zéro comme $1/T$.

Pour évaluer les corrections à l'approximation adiabatique, on calcule perturbativement la probabilité pour que le système passe de l'état initial $|\varphi_m\rangle$ à un autre état $|\varphi_k\rangle$. La probabilité de transition est donnée par (exercice 12.7.10)

$$\mathsf{p}_{m\to k}(t) = \left|\int_0^t \lambda_{km}(t')\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega_{km}(t')}\,\mathrm{d}t'\right|^2 \tag{12.153}$$

où

$$\lambda_{km}(t) = \langle\varphi_k(t)|\dot\varphi_m(t)\rangle \tag{12.154}$$

$\lambda_{km}(t)$ est une quantité caractéristique de la “vitesse de rotation” des vecteurs propres de $H(t)$ dans l’espace de Hilbert : c’est la composante suivant $|\varphi_k(t)\rangle$ de la vitesse du vecteur $|\varphi_m(t)\rangle$. Cette vitesse est de l’ordre de $\dot{R}/R$ et nous en déduisons l’estimation

$$\mathsf{p}_{m\to k}(t) \sim \left(\frac{\dot{R}}{R}\right)^2 \frac{1}{\omega_{km}^2} \tag{12.155}$$

### 12.6.3 La phase géométrique

Si l’approximation adiabatique est valable, l’équation (12.148) se réduit à une équation différentielle pour $c_m(t)$

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t)\,\langle\varphi_m|\dot{\varphi}_m\rangle \tag{12.156}$$

Il est facile de montrer que $\langle\varphi_m|\dot{\varphi}_m\rangle$ est un nombre imaginaire pur : en effet, de $\langle\varphi_m|\varphi_m\rangle = 1$ on tire

$$0 = \langle\dot{\varphi}_m|\varphi_m\rangle + \langle\varphi_m|\dot{\varphi}_m\rangle = \langle\varphi_m|\dot{\varphi}_m\rangle^* + \langle\varphi_m|\dot{\varphi}_m\rangle \tag{12.157}$$

et on peut poser, avec $\dot{\gamma}_m(t)$ réel

$$\dot{\gamma}_m(t) = \mathrm{i}\langle\varphi_m(R(t))|\dot{\varphi}_m(R(t))\rangle = -\mathrm{Im}\,\langle\varphi_m(R(t))|\dot{\varphi}_m(R(t))\rangle \tag{12.158}$$

où nous avons fait intervenir de façon explicite les paramètres $R(t)$ ; $\gamma_m(t)$ est à l’origine de la phase de Berry[16], et nous allons montrer que cette phase ne peut pas être éliminée par une redéfinition $|\varphi_m\rangle \to \exp(\mathrm{i}\chi)|\varphi_m\rangle$ du vecteur d’état.[17]. Le vecteur d’état au temps $t$ s’écrit alors

$$\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\gamma_m(t)}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_m(t)}\,|\varphi_m(R(t))\rangle \tag{12.159}$$

À première vue, cette équation est surprenante, car la phase de $|\varphi_m(R(t))\rangle$ est *a priori* arbitraire, et en extraire le facteur $\exp(\mathrm{i}\gamma_m(t)$ ne semble pas physiquement pertinent. Cependant, nous allons voir que cette phase donne lieu à des effets physiques si on fait varier les paramètres le long d’un contour

16. Cette phase n’est pas prise en compte par Messiah [1959] : en effet l’équation XVII(113’) de cette référence implique $\langle\varphi_m|\dot{\varphi}_m\rangle = 0$, voir l’exercice 12.7.10.

17. Dans le cas particulier étudié au § 12.6.1, on déduit immédiatement de (12.136)

$$\langle\psi_-|\dot{\psi}_-\rangle = -\frac{\mathrm{i}\omega}{2}(1+\cos\theta)$$

et plus généralement, pour $\phi(t)$ quelconque

$$\langle\psi_-|\dot{\psi}_-\rangle = \frac{\mathrm{i}\dot{\phi}}{2}(1+\cos\theta)$$

ce qui redonne bien (12.140).

fermé $C$ dans l'espace des paramètres. En premier lieu, nous pouvons récrire (12.158) sous la forme

$$\dot{\gamma}_m(t) = \mathrm{i}\langle\varphi_m(R(t))|\nabla_R\varphi_m(R(t))\rangle \cdot \dot{R}(t) = A_m(t)\cdot\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t} \qquad (12.160)$$

où $\nabla_R$ est le gradient *dans l'espace des paramètres* et (12.160) définit le vecteur $A_m$. Pour fixer les idées, on peut prendre le cas particulier où $R(t)$ est un vecteur $\vec{R}(t)$ de $\mathbb{R}^3$ : le gradient est alors le gradient ordinaire $\vec{\nabla}$. Si $R(t)$ décrit un contour fermé $C$, $R(T) = R(0)$, la variation de la phase sera

$$\boxed{\gamma_m(T) - \gamma_m(0) = \oint_C \dot{\gamma}_m(t)\mathrm{d}t = \mathrm{i}\oint_C \langle\varphi_m(R)|\nabla_R\varphi_m(R)\rangle\cdot\mathrm{d}R} \qquad (12.161)$$

Cette phase est la phase géométrique, ou phase de Berry : elle dépend *seulement* du contour $C$, c'est-à-dire du chemin suivi dans l'espace des paramètres, et non de la vitesse à laquelle il est parcouru. Elle est aussi indépendante du choix de phase fait pour $|\varphi_m\rangle$. Pour le voir, limitons-nous au cas où $R$ est un vecteur $\vec{R}$ de $\mathbb{R}^3$ ; d'après le théorème de Stokes[18], avec $\nabla_R = \vec{\nabla}$

$$\begin{aligned}\oint_C \langle\varphi_m(\vec{R})|\vec{\nabla}\varphi_m(\vec{R})\rangle\cdot\mathrm{d}\vec{R} &= \int\int_{\mathcal{S}(C)} \left[\vec{\nabla}\times\langle\varphi_m(\vec{R})|\vec{\nabla}\varphi_m(\vec{R})\rangle\right]\cdot\mathrm{d}\vec{\mathcal{S}}\\ &= \int\int_{\mathcal{S}(C)} (\vec{\nabla}\times\vec{A}_m)\cdot\mathrm{d}\vec{\mathcal{S}} \qquad (12.162)\end{aligned}$$

où $\mathcal{S}(C)$ est une surface s'appuyant sur le contour $C$. Si l'on effectue un changement de phase sur $|\varphi_m(\vec{R})\rangle$

$$|\varphi_m(\vec{R})\rangle \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\vec{R})}\,|\varphi_m(\vec{R})\rangle$$

alors

$$\langle\varphi_m|\vec{\nabla}\varphi_m\rangle \to \langle\varphi_m|\vec{\nabla}\varphi_m\rangle + \mathrm{i}\nabla\chi$$

Comme $\nabla\times(\vec{\nabla}\chi) = 0$, la phase $\chi$ ne contribue pas au résultat (12.161). L'exercice 12.7.11 montre comment retrouver le résultat particulier (12.141) à partir du cas général (12.161).

Il existe une relation remarquable entre la phase de Berry et celle de l'effet A-B. Considérons la situation où une particule chargée de charge $q$ est confinée dans une boîte centrée en $\vec{R}$, qui ne rencontre pas le solénoïde (figure 12.9). On montre alors (exercice 12.7.12) que si l'on fait faire à la boîte de façon adiabatique un tour complet autour du solénoïde, la fonction d'onde acquiert une phase $-q\Phi/\hbar$, où $\Phi$ est le flux du champ magnétique à travers le circuit effectué par la boîte. La phase de l'effet A-B est donc retrouvée comme une

18. Dans le cas général, on utilise la version du théorème de Stokes montrée en géométrie différentielle. Le gradient est remplacé par une 1-forme, le rotationnel par la différentielle extérieure, et la phase s'écrit comme le flux d'une 2-forme.

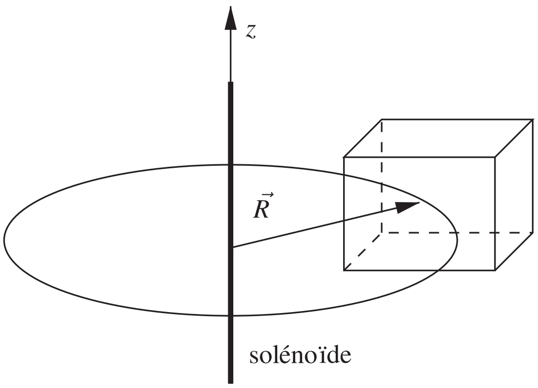



FIG. 12.9 – Phase de Berry et effet A-B : rotation d'une particule chargée autour d'un solénoïde très fin.

phase géométrique. Comme nous l'avons vu sur l'exemple du spin 1/2, la phase géométrique peut être interprétée comme l'analogue du transport parallèle d'un vecteur en géométrie différentielle. Ici le vecteur transporté parallèlement est le vecteur d'état ; le potentiel vecteur joue le rôle de la connexion et le champ celui de la courbure (voir par exemple Le Bellac [1988], chapitre 13). L'intégrale de contour de la connexion (potentiel vecteur) donne le flux du champ magnétique (courbure).

## 12.7 Exercices

### 12.7.1 Formule de Trotter

**1.** En effectuant un développement de Taylor à l'ordre $\varepsilon^2$ inclus, montrer que

$$\mathrm{e}^{(\varepsilon/2)A}\,\mathrm{e}^{\varepsilon B}\,\mathrm{e}^{(\varepsilon/2)A} = \mathrm{e}^{\varepsilon(A+B)} + O(\varepsilon^3)$$

**2.** Soit $A$ et $B$, deux opérateurs bornés. On se propose de montrer la formule de Trotter

$$\mathrm{e}^{A+B} = \lim_{n\to\infty}\left(\mathrm{e}^{A/n}\,\mathrm{e}^{B/n}\right)^n$$

Suggestions : montrer d'abord l'identité

$$C^n - D^n = (C-D)D^{n-1} + C(C-D)D^{n-2} + \cdots + C^{n-1}(C-D)$$

et en déduire pour deux opérateurs bornés $C$ et $D$

$$\|C^n - D^n\| \le n(\mathrm{cste})^n\|C-D\|$$

Pour terminer, faire l'identification

$$C \to \mathrm{e}^{(A+B)/n} \qquad D \to \mathrm{e}^{A/n}\,\mathrm{e}^{B/n}$$

et montrer

$$\left\| \mathrm{e}^{A+B} - \left(\mathrm{e}^{A/n}\,\mathrm{e}^{B/n}\right)^n \right\| = O\left(\frac{1}{n}\right)$$

### 12.7.2 Longueur de corrélation et niveau excité

**1.** Introduisons par analogie avec (12.50) la fonction ($\tau > \tau'$)

$$\begin{aligned} F(x_b, \tau_b; \tau, \tau'; x_a, \tau_a) &= \langle x_b|\mathrm{e}^{-H(\tau_b-\tau)/\hbar}\, X\, \mathrm{e}^{-H(\tau-\tau')/\hbar}\, X\, \mathrm{e}^{H(\tau_a-\tau')/\hbar}|x_a\rangle \\ &= \langle x_b|\mathrm{e}^{-H\tau_b/\hbar} X_{\mathrm{H}}(\tau) X_{\mathrm{H}}(\tau')\mathrm{e}^{H\tau_a/\hbar}|x_a\rangle \end{aligned}$$

où $X_{\mathrm{H}}(\tau)$ est défini par (12.42). En introduisant une double somme sur les états propres $|n\rangle$ de $H$, $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, montrer que

$$\lim_{\tau_a\to-\infty}\ \lim_{\tau_b\to+\infty} F = \varphi_0(x_b)\varphi_0^*(x_a)\langle 0|X\, \mathrm{e}^{-H(\tau-\tau')/\hbar}\, X|0\rangle$$

où $|0\rangle$ est l'état fondamental de $H$, $H|0\rangle = 0$, on a choisi $E_0 = 0$ et $\varphi_0(x)$ est la fonction d'onde de cet état fondamental.

**2.** En s'inspirant du § 12.2.3, montrer que la valeur moyenne dans l'état fondamental du produit ordonné dans le temps (euclidien) de $X_{\mathrm{H}}(\tau)$ et $X_{\mathrm{H}}(\tau')$ est

$$\langle 0|T(X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau'))|0\rangle = \lim_{\tau_a\to-\infty}\ \lim_{\tau_b\to+\infty} \frac{F(x_b, \tau_b; \tau, \tau'; x_a, \tau_a)}{F(x_b, \tau_b|x_a, \tau_a)}$$

Écrire ce résultat sous la forme d'une intégrale de chemin. Soit

$$\langle 0|T(X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau'))|0\rangle_c$$

la partie connexe de la valeur moyenne

$$\langle 0|T(X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau'))|0\rangle_c = \langle 0|T(X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau'))|0\rangle - \langle 0|X_{\mathrm{H}}(\tau)|0\rangle\langle 0|X_{\mathrm{H}}(\tau')|0\rangle$$

Montrer que

$$\langle 0|T(X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau'))|0\rangle_c = \sum_{n\neq 0} |\langle 0|X|n\rangle|^2 \mathrm{e}^{-E_n|\tau-\tau'|/\hbar}$$

Quel est le terme dominant quand $|\tau - \tau'| \to \infty$ ?

**3.** Considérons maintenant $x(\tau)$ comme un champ aléatoire *classique*, où $\tau$ varie de $-\infty$ à $+\infty$. Par définition, la fonction de corrélation $\langle x(\tau)x(\tau')\rangle$ est donnée par

$$\langle x(\tau)x(\tau')\rangle = \frac{1}{Z}\int \mathcal{D}x(\tau)\, x(\tau)x(\tau')\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{1}{2}\, m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V[x(\tau)]\right)\mathrm{d}\tau\right]$$

$$Z = \int \mathcal{D}x(\tau)\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{1}{2}\, m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V[x(\tau)]\right)\mathrm{d}\tau\right]$$

On définit la fonction de corrélation connexe $\langle x(\tau)x(\tau')\rangle_c$ par analogie avec la question **2** et la longueur de corrrélation $\xi$ par

$$\langle x(\tau)x(\tau')\rangle_c \propto \mathrm{e}^{-|\tau-\tau'|/\xi}$$

lorsque $|\tau-\tau'| \to \infty$. Montrer que la longueur de corrrélation $\xi$ est reliée à l'énergie $E_1(\equiv E_1 - E_0)$ du premier état excité.

### 12.7.3 Fonctionnelle génératrice

Prendre la première, puis la seconde dérivée fonctionnelle de (12.55)

$$\frac{\delta}{\delta j(t)} \qquad \frac{\delta^2}{\delta j(t)\delta j(t')}$$

et vérifier (12.56).

### 12.7.4 Propagateur de Feynman et propagateur euclidien

**1.** Vérifier qu'une solution particulière de (12.62) est

$$D_{\mathrm{F}}(t) = \frac{1}{2\omega}\left[\theta(t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \theta(-t)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right]$$

Cette solution particulière est appelée *propagateur de Feynman*. La solution générale de (12.62) s'obtient en ajoutant la solution générale (dépendant de deux constantes arbitraires) de l'équation homogène associée à (12.62).

**2.** La transformée de Fourier de (12.62) s'écrit

$$(k_0^2 - \omega^2)D(k_0) = \mathrm{i}$$

soit

$$D(k_0) = \mathrm{i}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k_0}{2\pi}\,\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0 t}}{k_0^2 - \omega^2}$$

L'ambiguïté de la fonction de Green se reflète dans l'apparition de pôles à $k_0 = \pm\omega$, ce qui fait que l'intégrale n'est pas définie. Montrer que si l'on traite les pôles en utilisant la prescription $\omega^2 \to \omega^2 - \mathrm{i}\eta, \eta \to 0^+$, alors on trouve que le propagateur $D_{\mathrm{F}}(t)$ de la question **1** est précisément

$$D_{\mathrm{F}}(t) = \mathrm{i}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k_0}{2\pi}\,\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0 t}}{k_0^2 - \omega^2 + \mathrm{i}\eta}$$

**3.** Montrer que si l'on passe au problème euclidien, alors la fonction de Green $D'_E(\tau)$ est donnée par

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} + \omega^2\right) D'_E(\tau) = \delta(\tau)$$

dont la solution est

$$D'_E(\tau) = \frac{1}{2\omega}\,\mathrm{e}^{-\omega|\tau|} + A\,\mathrm{e}^{\omega\tau} + B\,\mathrm{e}^{-\omega\tau}$$

### 12.7.5 Équation de Schrödinger et intégrale de chemin

On se propose de montrer que la fonction $K_E(x,\tau|x_0,\tau_0)$ définie par l'intégrale de chemin (12.37) ($\hbar = 1$ pour simplifier les équations)

$$K_E(x,\tau|x_0,\tau_0) = \int_{x(\tau_0)=x_0}^{x(\tau)=x} \mathcal{D}x(\tau)\exp\left[-\int_{\tau_0}^{\tau}\left(\frac{1}{2}\,m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V(x(\tau))\right)\mathrm{d}\tau\right]$$

obéit à l'équation de Schrödinger en temps euclidien (12.38). On part de l'équation de Chapman-Kolmogorov (12.28)

$$K_E(x,\tau+\varepsilon|x_0,\tau_0) = \int \mathrm{d}x'\,K_E(x,\tau+\varepsilon|x',\tau)K_E(x',\tau|x_0,\tau_0)$$

où $K_E(x,\tau+\varepsilon|x',\tau)$ est donné pour $\varepsilon\to 0$ par

$$K_E(x,\tau+\varepsilon|x',\tau) = \left(\frac{m}{2\pi\varepsilon}\right)^{1/2}\exp\left[-\frac{m}{2\varepsilon}(x-x')^2 - \varepsilon V(x)\right]$$

On posera $u = x' - x$. Montrer que l'intégrale sur $u$ (ou $x'$) est dominée par la région $u^2 \lesssim \varepsilon$. Montrer que l'on doit développer l'intégrand jusqu'à l'ordre $\varepsilon^2$ inclus et que l'on peut remplacer $\exp[-\varepsilon V(x+u)]$ par $1-\varepsilon V(x)$. En déduire

$$K_E(x,\tau+\varepsilon|x_0,\tau_0) = \left(1-\varepsilon V(x) + \frac{\varepsilon}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)K_E(x,\tau|x_0,\tau_0)$$

et écrire l'équation aux dérivées partielles vérifiée par $K_E$.

### 12.7.6 Calcul de la fonctionnelles génératrice pour l'oscillateur harmonique

On se propose de démontrer l'équation (12.63). Afin de simplifier les formules, on posera $\hbar = m = 1$. On montrera dans un premier temps la version euclidienne de (12.63). Il suffira ensuite d'effectuer un prolongement analytique. L'expression à évaluer est

$$\begin{aligned} Z([j];x_b,\tau_b;x_a,\tau_a) &= \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b}\mathcal{D}x(\tau)\exp\left[-\int_{\tau_a}^{\tau_b}\mathrm{d}\tau\left(\frac{1}{2}\,\dot{x}^2 + \frac{1}{2}\,\omega^2x^2 - j(\tau)x(\tau)\right)\right] \\ &= \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b}\mathcal{D}x(\tau)\exp[-S_E(x_b,\tau_b;x_a\tau_a;j)] \end{aligned}$$

où $S_E$ est l'action euclidienne nous allons écrire la trajectoire $x(\tau)$ sous la forme

$$x(\tau) = y(\tau) + h(\tau)$$

où $y(\tau)$ est une solution des équations du mouvement avec source ($j \neq 0$)

$$-\ddot{y} + \omega^2 y = j$$

obéissant à $y(\tau_a) = x_a$, $y(\tau_b) = x_b$ et $h(\tau)$ une solution des équations du mouvement libre ($j = 0$) vérifiant $h(\tau_a) = h(\tau_b) = 0$.

**1.** Montrer que

$$y(\tau) = y_0(\tau) + \int_{\tau_a}^{\tau_b} G(\tau, \tau') j(\tau') \mathrm{d}\tau'$$

où $y_0(\tau)$ est solution des équations du mouvement libre vérifiant $y_0(\tau_a) = x_a$, $y_0(\tau_b) = x_b$, et la fonction de Green $G(\tau, \tau')$ est

$$G(\tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') u(\tau) v(\tau') + \theta(\tau' - \tau) v(\tau) u(\tau')$$

Les fonctions $u$ et $v$ sont les solutions suivantes des équations du mouvement libre

$$u(\tau) = \lambda \sinh \omega(\tau_b - \tau) \qquad v(\tau) = \lambda' \sinh \omega(\tau - \tau_a)$$

Montrer que l'on doit choisir

$$\lambda\lambda' = \frac{1}{\omega \sinh \omega T} \qquad T = \tau_b - \tau_a$$

Suggestion : montrer que

$$\left( \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} - \omega^2 \right) G = \delta(\tau)[\dot{u}(0) v(0) - u(0) \dot{v}(0)]$$

**2.** Calculer l'action euclidienne $S_E$ et la mettre sous la forme

$$\begin{aligned} S_E(x_b, \tau_b; x_a \tau_a; j) &= \frac{1}{2} y(\tau) \dot{y}(\tau) \Big|_{\tau_a}^{\tau_b} - \frac{1}{2} \int \mathrm{d}\tau \, j(\tau) y(\tau) + S_h \\ &= \overline{S}_E(x_b, \tau_b; x_a \tau_a; j) + S_h \end{aligned}$$

On pourra remarquer que $S_E[y + h] = S_E[y] + S_E[h]$ : pourquoi ?

**3.** Évaluer $\overline{S}_E(x_b, \tau_b; x_a \tau_a; j)$

$$\begin{aligned} \overline{S}_E(x_b, \tau_b; x_a \tau_a; j) = &\frac{\omega}{2 \sinh \omega T} \left[ (x_a^2 + x_b^2) \cosh \omega T - 2 x_a x_b \right] \\ &- \frac{x_a}{\sinh \omega T} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \sin[\omega(\tau_b - \tau)] j(\tau) \mathrm{d}\tau \\ &- \frac{x_b}{\sinh \omega T} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \sinh[\omega(\tau - \tau_a)] j(\tau) \mathrm{d}\tau \\ &- \frac{1}{\omega \sinh \omega T} \int \int \mathrm{d}\tau \mathrm{d}\tau' j(\tau) \theta(\tau - \tau') \sinh[\omega(\tau_b - \tau)] \\ &\times \sinh[\omega(\tau' - \tau_a)] j(\tau') \end{aligned}$$

**4.** Il existe plusieurs méthodes pour évaluer la contribution de $S_h$ à l'intégrale de chemin ($\tau_a = 0, \tau_b = \tau$)

$$S_h = \int_{h(0)=h(\tau)=0} \mathcal{D}[h(\tau)] \exp\left[-\frac{1}{2}\int_0^\tau (\dot{h}^2 + \omega^2 h^2)\mathrm{d}\tau'\right]$$

La méthode la plus directe, et sans doute la plus instructive (mais non la plus rapide), consiste à revenir à la définition de l'intégrale de chemin en la discrétisant. On divise l'intervalle $[0, \tau]$ en $n$ intervalles de longueur $\varepsilon = \tau/n$, et

$$I = \lim_{\varepsilon\to 0}\left(\frac{1}{2\pi\varepsilon}\right)^{n/2} \int \prod_{i=1}^{n-1} \mathrm{d}h_i \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n-1} h_i A_{ij} h_j\right]$$

où $A$ est une matrice $(n-1)\times(n-1)$ de la forme

$$A = \frac{2}{\varepsilon}\left(1 - \frac{1}{2}\,\varepsilon^2\omega^2\right)\begin{pmatrix} 1 & -a & 0 & \ldots & 0 \\ -a & 1 & -a & \ldots & \vdots \\ 0 & -a & 1 & -a & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ldots & \ldots & -a & 1 \end{pmatrix}$$

avec

$$a = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{2}\,\varepsilon^2\omega^2\right)$$

En déduire

$$I = \left(\frac{1}{2\pi\varepsilon}\right)^{n/2} \frac{(2\pi)^{(n-1)/2}}{(\det A)^{1/2}}$$

Pour calculer $\det A$, on remarque que le déterminant $D_n$ de la matrice $n\times n$ vérifie la relation de récurrence

$$D_n = D_{n-1} - a^2 D_{n-2}$$

Montrer (ou vérifier) que la solution de cette relation de récurrence est

$$D_n = \frac{1}{\cos\theta - \sin\theta}\left[\cos^{n+1}\theta - \sin^{n+1}\theta\right]$$

avec $a = \sin^2\theta\cos^2\theta$, $\theta < \pi/4$. En déduire le résultat final pour $I$

$$I = \left[\frac{\omega}{2\pi\sinh\omega\tau}\right]^{1/2}$$

**5.** On s'intéresse au cas où la source $j(\tau)$ est non nulle uniquement dans un intervalle $[0, T]$. On part de la forme opératorielle de $Z(j)$

$$Z(j) = \langle x_b|\mathrm{e}^{-H(\tau_b - T)}\, U_j(T, 0)\,\mathrm{e}^{H\tau_a}|x_a\rangle$$

où $U_j$ est l'opérateur d'évolution en temps euclidien qui vérifie

$$\frac{\mathrm{d}U_j(\tau,\tau_a)}{\mathrm{d}\tau} = -HU_j(\tau,\tau_a) + j(\tau)U_j(\tau,\tau_a) \qquad U_j(\tau_a,\tau_a) = I$$

On prend la limite $\tau_a \to -\infty, \tau_b \to \infty$. Montrer que cette limite est contrôlée uniquement par l'état fondamental $|0\rangle$ de $H$, que l'on prendra d'énergie nulle : $E_0 = 0$. En déduire que la valeur moyenne sur l'état fondamental (en général appelée valeur moyenne sur le vide) de $U_j$ est

$$\lim_{\tau_a\to-\infty}\lim_{\tau_b\to+\infty}\langle 0|U_j(\tau_b,\tau_a)|0\rangle = Z(j)\int \mathrm{d}x_a\mathrm{d}x_b\, \varphi_0(x_b)\varphi_0^*(x_a)$$

où $\varphi_0(x) = \langle x|0\rangle$ est la fonction d'onde de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{1/4}\exp\left[-\frac{1}{2}\omega x^2\right]$$

Effectuer l'intégration sur $x_a$ et $x_b$ et montrer que

$$\lim_{\tau_a\to-\infty}\lim_{\tau_b\to+\infty}\langle 0|U_j(\tau_b,\tau_a)|0\rangle = \exp\left[\frac{1}{2}\int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau'\, j(\tau)D_E(\tau-\tau')j(\tau')\right]$$

où

$$D_E(\tau) = \frac{1}{2\omega}\,\mathrm{e}^{-\omega|\tau|}$$

est le propagateur euclidien

**6.** Effectuer le prolongement analytique $\tau \to \mathrm{i}t$ pour obtenir les résultats en temps réel, en particulier (12.63). Montrer que le prolongement du résultat de la question **5** devient

$$\lim_{t_a\to-\infty}\lim_{t_b\to+\infty}\langle 0|U_j(t_b,t_a)|0\rangle = \exp\left[-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}t\mathrm{d}t'\, j(t)D_F(t-t')j(t')\right]$$

où $D_F$ est le propagateur de Feynman (exercice 12.7.4). En fait, il est nécessaire de donner une partie imaginaire[19] à $t$ : $t_a = |t_a|\exp[\mathrm{i}(\pi-\theta)]$, $t_b = |t_b|\exp[-\mathrm{i}\theta]$, avec $0 < \theta < \pi/2$. Les résultats de cet exercice sont d'une importance fondamentale en théorie quantique des champs.

### 12.7.7 Formules de raccordement pour $K < 0$

On suppose que la région $x > 0$ au voisinage du point de rebroussement à $x = 0$ est la région interdite classiquement

$$E - V(x) = -|K|x$$

19. Voir par exemple Parisi [1989], chapitre 13.

La fonction d'onde BKW s'écrit dans la région $x < 0$ comme

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left( A_1 \exp\left[-\mathrm{i}\int_0^x k(u)\,\mathrm{d}u\right] + A_2 \exp\left[\mathrm{i}\int_0^x k(u)\,\mathrm{d}u\right]\right)$$

et dans la région $x > 0$

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \left( B_1 \exp\left[\int_0^x \kappa(u)\,\mathrm{d}u\right] + B_2 \exp\left[-\int_0^x \kappa(u)\,\mathrm{d}u\right]\right)$$

Montrer que si $C_B = 0$ (voir (12.93)), on peut obtenir les relations

$$A_1 = B_2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4} \qquad A_2 = B_2\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}$$

En déduire (12.95).

### 12.7.8 Propriétés de la distribution de Wigner

**1.** Démontrer l'inégalité suivante pour deux opérateurs statistiques $\rho$ et $\rho'$

$$0 \le \mathrm{Tr}(\rho\rho') \le 1$$

Suggestion : écrire

$$\rho = \sum_n \mathsf{p}_n |i_n\rangle\langle i_n| \qquad \rho' = \sum_n \mathsf{p}'_n |\alpha_n\rangle\langle\alpha_n|$$

Montrer que cette égalité est saturée si et seulement si $\rho = \rho' = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ (cas pur).

**2.** Déduire la relation (12.121) de l'inégalité précédente. En prenant

$$\rho = |\varphi\rangle\langle\varphi| \qquad \rho' = |\psi\rangle\langle\psi| \qquad \langle\psi|\varphi\rangle = 0$$

montrer que $w$ doit nécessairement prendre des valeurs négatives. Enfin, en prenant $\rho = \rho' = |\varphi\rangle\langle\varphi|$, déduire (12.125).

### 12.7.9 Évolution temporelle de la distribution de Wigner

On part de l'équation d'évolution (11.33) dont on déduit celle des éléments de matrice $\langle p|\rho|p'\rangle$ (ou $\langle x|\rho|x'\rangle$) de $\rho$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle p|\rho|p'\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle p|[\rho, H]|p'\rangle$$

L'équation d'évolution de $w(x, p; t)$ s'obtient à partir de (12.117) avec $p \to p + z/2$, $p' \to p - z/2$.

**1.** *Terme d'énergie cinétique.* Soit $H = K + V$, la décomposition de $H$ en énergie cinétique $K$ et énergie potentielle $V$. Montrer que la contribution de $K$ à l'évolution de $w$ est

$$\frac{\partial}{\partial t} w(x,p;t)\Big|_K = -\frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial x} w(x,p;t)$$

**2.** *Terme d'énergie potentielle.* On se sert cette fois de la représentation (12.116) de $w$, en partant de $\langle x|\rho|x'\rangle$ avec $x \to x+y/2$, $x' \to x-y/2$. Montrer que la contribution de $V$ à l'évolution de $w$ est le deuxième terme de (12.122). En utilisant un développement de Taylor, montrer

$$\frac{\partial}{\partial t} w(x,p;t)\Big|_V = \sum_{n\,\mathrm{impair}} \frac{1}{n!}\left(\frac{-\mathrm{i}\hbar}{2}\right)^{n-1} \frac{\mathrm{d}^n V(x)}{\mathrm{d}x^n}\,\frac{\partial^n}{\partial p^n} w(x,p;t)$$

Cette équation semble conduire à un développement en puissances de $\hbar$, mais c'est une illusion, sauf cas particulier : il est clair sur (12.129) que $\partial/\partial p$ introduit des puissances de $1/\hbar$.

### 12.7.10 Probabilités de transition à l'approximation adiabatique

**1.** Suivant Messiah [1959], chapitre XVII, on définit l'opérateur unitaire $A(t)$ permettant de "passer aux axes tournants", c'est-à-dire de suivre les vecteurs propres de $H(t)$ que l'on suppose non dégénérés, par

$$|\varphi_j(t)\rangle = A(t)|\varphi_j(0)\rangle$$

où $|\varphi_j(0)\rangle$ et $|\varphi_j(t)\rangle$ sont vecteurs propres de $H(0)$ et $H(t)$ (*cf.* (12.142) et (12.143)). On pose $\hbar = 1$ pour simplifier les notations. L'opérateur hermitien $K(t)$ est défini par l'évolution de $A(t)$

$$\mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = K(t)A(t) \qquad\qquad A(0) = 1$$

Les opérateurs $A(t)$ et $K(t)$ ne sont pas uniques. Montrer qu'un choix possible est

$$K(t) = \mathrm{i}\sum_j \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}_j(t) = -\mathrm{i}\sum_j \mathcal{P}_j(t)\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t}$$

où $\mathcal{P}_j(t)$ est le projecteur sur $|\varphi_j(t)\rangle$

$$\mathcal{P}_j(t) = |\varphi_j(t)\rangle\langle\varphi_j(t)| = A(t)\mathcal{P}_j(0)A^\dagger(t)$$

Suggestion : montrer que

$$\mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t} = [K, \mathcal{P}_j]$$

**2.** On introduit l'opérateur unitaire $\Phi(t)$ par

$$\Phi(t) = \sum_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_j(t)}\,\mathcal{P}_j(0)$$

où $\alpha_j(t)$ est défini en (12.147). On note que $\Phi(t)$ obéit à

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}t} = H^{(A)}(t)\Phi(t) \qquad\qquad H^{(A)}(t) = \sum_j E_j(t)\mathcal{P}_j(0)$$

À l'approximation adiabatique, l'opérateur d'évolution est $U_A(t,0) = A(t)\Phi(t)$, car

$$U_A(t,0)|\varphi_j(0)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_j(t)}\,|\varphi_j(t)\rangle$$

Pour étudier les déviations à l'approximation adiabatique, on écrit

$$U(t,0) = U_A(t,0)\hat{U}(t,0) = A(t)\Phi(t)\hat{U}(t,0)$$

Expliquer pourquoi $\hat{U}(t,0)$ est l'opérateur d'évolution dans les axes tournants. Montrer que

$$\mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} = W\hat{U} \qquad\qquad W = -\Phi^\dagger A^\dagger K A\Phi$$

**3.** Au premier ordre en théorie des perturbations, on peut écrire

$$\hat{U}(t,0) = I - \mathrm{i}\int_0^t W(t')\mathrm{d}t'$$

Si on part au temps $t=0$ de l'état $|\varphi_m(0)\rangle$, la probabilité de transition $m \to k$ est donnée au temps $t$ par

$$\mathsf{p}_{m\to k}(t) = |\langle\varphi_k(t)|U(t,0)|\varphi_m(0)\rangle|^2$$

En déduire

$$\begin{aligned}\mathsf{p}_{m\to k}(t) &\simeq |\langle\varphi_k(0)|F(t)|\varphi_m(0)\rangle|^2\\ F(t) &= \int_0^t \Phi^\dagger(t')A^\dagger(t')K(t')A(t')\Phi(t')\,\mathrm{d}t'\end{aligned}$$

d'où

$$\mathsf{p}_{m\to k}(t) \simeq \left|\int_0^t \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}[\alpha_k(t')-\alpha_m(t')]}\langle\varphi_k(t')|\dot{\varphi}_m(t')\rangle\,\mathrm{d}t'\right|^2$$

ce qui montre (12.153).

**4.** Montrer que les résultats de la question **1** impliquent

$$|\dot{\varphi}_m(t)\rangle = \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_m}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(t)\rangle$$

Suggestion : examiner $\mathrm{d}(\mathcal{P}_m|\varphi_m(t)\rangle)/\mathrm{d}t$ et utiliser $|\varphi_m(t)\rangle = A(t)|\varphi(0)\rangle$. En déduire

$$\mathcal{P}_m(t)|\dot{\varphi}_m(t)\rangle = 0$$

et donc $\langle\varphi_m|\dot{\varphi}_m\rangle = 0$. *Le choix de phase implicite fait dans la question* **1** *interdit d'obtenir la phase de Berry.*

**5.** Construire l'opérateur $K$ dans le cas étudié au § 12.6.1 et montrer que

$$K = \frac{1}{2}\,\dot{\phi}\,\vec{\sigma}\cdot\left(\hat{n}\times\frac{\mathrm{d}\hat{n}}{\mathrm{d}t}\right)$$

où $\hat{n}$ est le vecteur unitaire d'angles polaires $(\theta, \phi(t))$. Vérifier que l'on a bien $\langle\psi_-|\dot{\psi}_-\rangle = 0$ pour $t$ infinitésimal, contrairement au traitement donné dans le § 12.6.1.

### 12.7.11 Spin 1/2 dans un champ magnétique : relation avec l'étude générale

**1.** L'équation (12.160) définit un vecteur $A_m$ *dans l'espace des paramètres.* Afin de simplifier les notations, on suppose que $\nabla_R$ a les propriétés d'un gradient dans $\mathbb{R}^3$. En introduisant un système complet d'états $\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = I$, montrer que

$$(\nabla\times A_m)_i = -\mathrm{Im}\left(\sum_{jk}\sum_n \varepsilon_{ijk}\langle\partial_j\varphi_m|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\partial_k\varphi_m\rangle\right)$$

**2.** En partant de $H(R)|\varphi_n(R)\rangle = E_n(R)|\varphi_n(R)\rangle$, déduire

$$(\nabla\times A_m)_i = -\mathrm{Im}\left(\sum_{jk}\sum_n \varepsilon_{ijk}\frac{\langle\varphi_m|\partial_j H|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\partial_k H|\varphi_m\rangle}{(E_n-E_m)^2}\right)$$

**3.** On revient à l'exemple du § 12.6.1 où le hamiltonien est

$$H = -\frac{1}{2}\,\gamma\hbar\vec{B}\cdot\vec{\sigma}$$

Le paramètre est $\vec{B}$ et $\partial_i$ est la dérivée par rapport à $B_i$. Montrer que $(\nabla\times A_m)$ se met sous la forme

$$(\nabla\times A_m) = -\frac{\hat{B}}{2B^2}$$

et que

$$\int\!\!\int \mathcal{S}(C)(\nabla\times A_m)\cdot\mathrm{d}\mathcal{S} = -\frac{1}{2}\,\Omega$$

où $\Omega$ est l'angle solide sous lequel le contour $C$ est vu depuis l'origine.

### 12.7.12 Phase de Berry et effet Aharonov-Bohm

**1.** Considérons une particule chargée de charge $q$ confinée dans une boîte centrée en $\vec{R}$ qui ne rencontre pas le solénoïde (figure 12.9). En l'absence de tout champ magnétique (pas de courant dans le solénoïde), la fonction d'onde de la particule est $\varphi_m(\vec{r}-\vec{R})$. On suppose maintenant que le courant passe dans le solénoïde ; le champ magnétique reste nul à l'intérieur de la boîte. Bien que $\vec{B}=0$, on doit cependant choisir $\vec{A}\neq 0$. Montrer que la fonction d'onde devient

$$\Psi_m(\vec{r};\vec{R}) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}q}{\hbar}\int_{\vec{R}}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{r}\,'\right)\varphi_m(\vec{r}-\vec{R})$$

**2.** On fait décrire à la boîte de façon adiabatique un tour complet autour du solénoïde. Montrer que dans les notations de (12.160)

$$\vec{A}_m(\vec{R},t) = \mathrm{i}\langle\Psi_m(\vec{r};\vec{R})|\vec{\nabla}_{\vec{R}}\Psi_m(\vec{r};\vec{R})\rangle$$

et calculer $\vec{A}_m$

$$\vec{A}_m = -\frac{q}{\hbar}\,\vec{A}(\vec{R}) + \mathrm{i}\int \mathrm{d}^3r\,\varphi_m^*(\vec{r}-\vec{R})\,\vec{\nabla}_{\vec{R}}\varphi_m(\vec{r}-\vec{R})$$

**3.** Montrer que si l'on fait un tour complet autour du solénoïde

$$\oint_C \vec{A}_m(\vec{R})\cdot\mathrm{d}\vec{R} = -\frac{q\Phi}{\hbar}$$

où $\Phi$ est le flux du champ magnétique à travers le contour $C$.

## 12.8 Bibliographie

L'article de référence sur l'approximation semi-classique est celui de Berry [1991] ; voir aussi les livres de Gutzwiller [1990] et de Stöckman [1999]. On pourra compléter l'exposé de l'intégrale de chemin par les livres de Schulman [1981], Parisi [1989], chapitres 13 et 14, ou Zinn-Justin [2003]. Notre exposé de l'approximation BKW est inspiré de celui de Child [1991], Appendice A. Une bonne introduction à la distribution de Wigner se trouve dans Ballentine [1998], chapitre 15, que l'on pourra compléter par l'article de revue de Hillery *et al.* [1984]. Les articles essentiels sur les phases géométriques sont rassemblés dans Shapere et Wilczek [1989].

# Chapitre 13

# Théorie de la diffusion

Jusqu'à présent, nous avons étudié principalement les états liés, et les états de diffusion n'ont été examinés que dans le cas à une dimension (§ 8.3.4). Cependant, des informations essentielles sur les interactions entre particules, atomes, molécules, etc., ainsi que sur la structure des objets composés, peuvent être obtenues par des expériences de diffusion[1] (ou de collision). Les états liés ne donnent que des informations partielles sur ces interactions − et parfois ils n'existent même pas −, tandis qu'il est pratiquement toujours possible de réaliser des expériences de collision. Dans un premier temps, nous allons examiner la diffusion par un potentiel, qui permet de décrire les collisions élastiques de deux particules incidentes de masses $m_1$ et $m_2$. En effet, en se plaçant dans le référentiel du centre de masse[2], on se ramène au cas d'une particule de masse $m = (m_1 m_2)/(m_1 + m_2)$ dans un potentiel (exercice 7.5.6). Nous généraliserons ensuite le formalisme aux collisions inélastiques.

Les sections 13.1 et 13.2 développent le formalisme élémentaire de la théorie de la diffusion élastique, en mettant l'accent sur la limite de basse énergie, qui joue un rôle très important en pratique. La section 13.3 généralise le formalisme au cas inélastique, ou plus exactement décrit la répercussion des voies inélastiques sur la diffusion élastique. La section 13.4 est consacrée à des développements plus formels et la section 13.5 traite de l'approche opératorielle de la diffusion.

---

1. La terminologie française prête à confusion : diffusion a deux significations, soit collision d'une particule sur une autre, soit mouvement régi par une équation de diffusion, souvent relié à une marche aléatoire. Cette ambiguïté n'existe pas en anglais : collision est traduit par “scattering” et diffusion par “diffusion”.

2. Dans les anneaux de collision comme le LHC (Large Hadron Collider), anneau de collision proton-proton mis en service au CERN en 2009, le référentiel du centre de masse est identique à celui du laboratoire.

# 13.1 Section efficace et amplitude de diffusion

## 13.1.1 Sections efficaces différentielle et totale

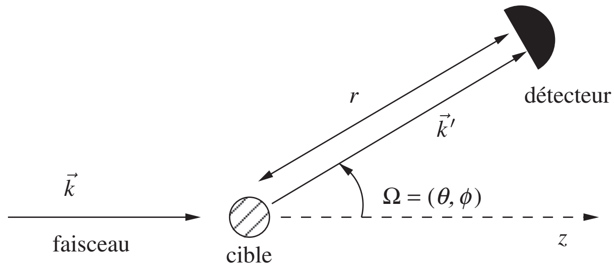



FIG. 13.1 – Schéma d'une expérience de diffusion.

Le schéma d'une expérience de diffusion est donné sur la figure 13.1. Un faisceau de particules de masse $m_1$ et d'impulsion bien définie dirigée suivant l'axe $Oz$ entre en collision avec une cible de particules de masse $m_2$. Pour simplifier la discussion, on supposera $m_1 \ll m_2$, et on négligera le recul de la cible dans la collision. Dans le cas général, il faut passer du référentiel du laboratoire au référentiel du centre de masse par une transformation cinématique simple (exercice 7.5.6). Une fraction des particules incidentes est déviée par la collision avec la cible et les particules qui ont subi une collision sont enregistrées par des détecteurs placés dans une direction d'angles polaires $(\theta, \phi)$, appelés *angles de diffusion*, notés collectivement $\Omega$. Soit $\Delta\mathcal{S}$ la surface d'un détecteur placé à une distance $r$ de la cible. Ce détecteur est vu de la cible sous un angle solide $\Delta\Omega \simeq \Delta\mathcal{S}/r^2$. On suppose que la densité $n_c$ de particules cibles est suffisamment faible pour que les collisions multiples puissent être négligées. Dans ces conditions, le nombre $\Delta\mathcal{N}(\Omega)$ de particules ayant subi une collision et enregistrées par le détecteur est proportionnel, par unité de temps et par unité de volume de la cible,

- au flux $\mathcal{F}$ de particules incidentes, c'est-à-dire au nombre de particules traversant une surface unité perpendiculaire à $Oz$ par unité de temps : $\mathcal{F} = n_i v$, où $n_i$ est la densité de particules incidentes et $v$ leur vitesse ;
- à la densité $n_c$ de particules cibles ;
- pour $\Delta\Omega$ suffisamment petit, à l'angle solide $\Delta\Omega$ sous lequel est vu le détecteur depuis la cible (figure 13.1). Par la suite, nous supposerons cet angle solide infinitésimal : $\Delta\Omega \to \mathrm{d}\Omega$.

Nous avons donc

$$\mathrm{d}\mathcal{N}(\Omega) = \mathcal{F}\, n_c \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\,\mathrm{d}\Omega \tag{13.1}$$

Le facteur de proportionnalité, $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$, est appelé *section efficace différentielle de diffusion*, ou *section efficace différentielle de collision*. L'analyse dimensionnelle montre que $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ a les dimensions d'une surface et se mesure en

$\mathrm{m}^2$/stéradian. En intégrant sur $\Omega$, on obtient la *section efficace totale* $\sigma_{\mathrm{tot}}$

$$\boxed{\sigma_{\mathrm{tot}} = \int \mathrm{d}\Omega\, \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}} \tag{13.2}$$

*Le produit $\mathcal{F} n_c \sigma_{\mathrm{tot}}$ est égal au nombre de collisions enregistrées par seconde dans l'expérience pour une cible de volume unité.* La section efficace totale est *a priori* une fonction de la vitesse $v$ de la particule incidente, ou de façon équivalente, de son énergie. La section efficace différentielle est une fonction de l'énergie et des angles $\theta$ et $\phi$. Lorsque le problème physique est invariant par rotation[3] autour de l'axe $Oz$, la section efficace différentielle ne dépend que de $\theta$.

Donnons une illustration intuitive de la notion de section efficace en examinant en mécanique classique la collision de deux boules de billard de rayons $R_1$ et $R_2$. Supposons d'abord que les particules incidentes (ici les boules de billard) ont un rayon $R$ et que les particules cibles sont ponctuelles. En une seconde, une particule incidente balaie un volume $\pi R^2 v$, et elle rencontre donc $n_c \pi R^2 v$ particules cibles. Le nombre de collisions enregistrées par seconde dans l'expérience est $n_i n_c \pi R^2 v = \mathcal{F} n_c \pi R^2$, d'où la section efficace totale $\sigma_{\mathrm{tot}} = \pi\, R^2$. C'est géométriquement la surface d'un disque de rayon $R$. Cette section efficace est aussi celle de la diffusion de particules ponctuelles par des cibles de rayon $R$, et dans ce cas l'origine géométrique de $\pi R^2$ est claire : c'est l'aire que présente la cible à une particule incidente. La section efficace totale lorsque les particules incidentes ont un rayon $R_1$ et les particules cibles un rayon $R_2$ se déduit du résultat précédent : le nombre de collisions est le même que si les particules incidentes étaient ponctuelles et les particules cibles avaient un rayon $(R_1 + R_2)$. La section efficace totale est donc

$$\sigma_{\mathrm{tot}} = \pi (R_1 + R_2)^2 \tag{13.3}$$

La section efficace différentielle s'obtient aisément dans le cas de particules incidentes ponctuelles (figure 13.2) arrivant sur des cibles de rayon $R$. Le *paramètre d'impact* $b$ de la collision est la plus petite distance entre la trajectoire incidente en l'absence de collision et le centre de la cible. La figure 13.2 montre que le paramètre d'impact et l'angle de diffusion $\theta$ sont reliés par

$$b = R \cos\frac{\theta}{2}$$

tandis que

$$\mathrm{d}\sigma = 2\pi b \mathrm{d}b = \pi R^2 \sin\frac{\theta}{2} \cos\frac{\theta}{2}\, \mathrm{d}\theta = \frac{1}{2}\, \pi R^2 \mathrm{d}(\cos\theta)$$

3. Cette invariance n'est pas valable, par exemple, si le potentiel n'est pas invariant par rotation ou si les particules cibles ont un spin polarisé suivant un axe perpendiculaire à $Oz$ avec une diffusion dépendant du spin.

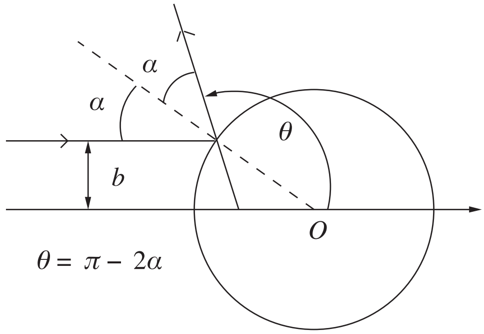



FIG. 13.2 – Collision classique d'une particule ponctuelle sur une sphère de rayon $R$.

d'où la section efficace différentielle

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{2\pi}\,\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\cos\theta} = \frac{1}{4}\,R^2 \tag{13.4}$$

car l'intégration sur $\phi$ donne un facteur $2\pi$. Cette section efficace, appelée *section efficace de diffusion par une sphère dure*, est donc indépendante de l'angle de diffusion, ou isotrope. On vérifie que l'intégration sur $\Omega$ redonne bien $\pi R^2$.

### 13.1.2 Amplitude de diffusion

Venons-en maintenant à la description quantique de la diffusion par un potentiel $V$ *que nous supposons à symétrie sphérique* : $V(r)$. Nous reviendrons à un potentiel général $V(\vec{r})$ à partir du § 13.3.2. Nous ignorons les éventuels degrés de liberté de spin, sauf au § 13.2.4. La diffusion est un processus dépendant du temps : une particule incidente décrite par un paquet d'ondes $\varphi(\vec{r},t)$ part de $z=-\infty$, se propage le long de l'axe $Oz$ et rencontre le potentiel à un temps $t\sim 0$. Ce paquet d'ondes a une certaine probabilité d'être diffusé dans la direction $\theta$, et le détecteur placé dans cette direction une certaine probabilité d'enregistrer la particule. La description quantique correcte ne peut se faire qu'en utilisant des paquets d'ondes. Toutefois, cette description est un peu délicate et nous allons dans un premier temps la simplifier en considérant un processus stationnaire ; nous reviendrons ultérieurement (§ 13.4.3) sur l'utilisation des paquets d'ondes. Nous partirons d'une onde plane incidente de vecteur d'onde $\vec{k}=(0,0,k)$ parallèle à $Oz$

$$\varphi(\vec{r}) = A\,\mathrm{e}^{ikz} \qquad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\,E \tag{13.5}$$

où $m$ est la masse des particules incidentes, $E$ leur énergie et $|A|^2 = n_i$ leur densité. Le courant $\vec{\jmath}$ associé à l'onde plane (13.5) est donné par (8.123)

$$\vec{\jmath} = \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\varphi^*\vec{\nabla}\varphi - (\vec{\nabla}\varphi)^*\varphi\right) = |A|^2\frac{\hbar\vec{k}}{m} = |A|^2\vec{v} \tag{13.6}$$

Le flux de particules incidentes $\mathcal{F} = |\vec{\jmath}| = |A|^2 v$. L'onde plane $\varphi(\vec{r})$ est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps en l'absence de potentiel $(V(r) = 0)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \tag{13.7}$$

Lorsque $V(r) \neq 0$, pour une *même valeur de l'énergie* $E$, nous montrerons au § 13.4.1 qu'il existe des solutions de l'équation de Schrödinger $\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r})$ indicées par le vecteur d'onde $\vec{k}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}) = E\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}) \tag{13.8}$$

se comportant pour $r \to \infty$ comme

$$\boxed{\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}) = A\left(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\Omega)\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}\right)} \tag{13.9}$$

où $f$ est une fonction complexe de $\Omega$ – dans notre cas uniquement de $\theta$ en raison de l'invariance par rotation autour de $Oz$ –, appelée *amplitude de diffusion* et $A$ une constante de normalisation que nous choisirons en général égale à 1, $A = 1$. Le premier terme de (13.9) est l'onde plane incidente $\exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}) = \exp(\mathrm{i}kz)$, et le deuxième représente une *onde sphérique sortante*, ce que nous allons montrer dans un instant. Il est essentiel de remarquer que ce sont les valeurs absolues $k$ et $r$ qui figurent dans ce deuxième terme. L'expression (13.9) est valable pourvu que le potentiel $V(r)$ décroisse suffisamment vite pour $r \to \infty$. Elle n'est pas valable pour un potentiel coulombien, dont la décroissance en $1/r$ est trop lente. Il existe aussi des solutions de l'équation de Schrödinger avec un terme d'onde sphérique entrante

$$\psi^{(-)}_{\vec{k}}(\vec{r}) = A\left(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\Omega)\frac{\mathrm{e}^{\,-\mathrm{i}kr}}{r}\right) \tag{13.10}$$

solutions sur lesquelles nous reviendrons ultérieurement.

Calculons le courant total pour la fonction d'onde asymptotique (13.9). Ce courant se compose du courant de l'onde plane, de celui de l'onde sphérique et d'un terme d'interférences. C'est ici que nous devons faire appel à un argument physique, car l'extension transverse de l'onde plane est en fait limitée, et non infinie (figure 13.3), et sauf dans la région de recouvrement du paquet d'ondes

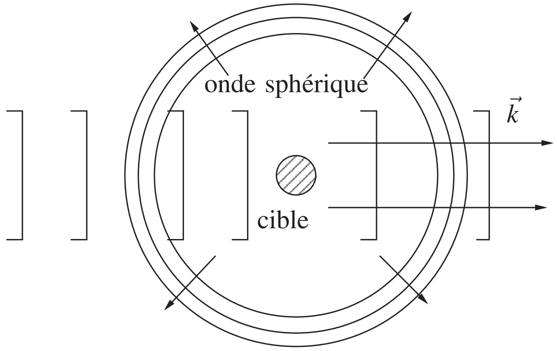



FIG. 13.3 – Limitation de l'onde plane incidente.

incident et de l'onde sphérique, le terme d'interférences s'annule[4]. Dans une direction $\theta \neq 0$, c'est-à-dire en dehors de la direction de l'onde incidente $\theta = 0$, il est toujours possible de placer le détecteur suffisamment loin de la cible pour que le terme d'interférences soit négligeable, et il suffit donc de calculer le courant de l'onde sphérique. En utilisant $\vec{\nabla} g(r) = \hat{r}\, g'(r)$, on obtient

$$\vec{\nabla}\left(\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}\, f(\Omega)\right) = \mathrm{i}k\hat{r}\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}\, f(\Omega) + O\left(\frac{1}{r^2}\right)$$

En effet,

$$\left|\vec{\nabla}\frac{1}{r}\right| \propto \frac{1}{r^2} \quad \text{et} \quad |\vec{\nabla} f(\Omega)| \propto \frac{1}{r}$$

et l'expression finale de $\vec{\jmath}$ est

$$\vec{\jmath} = \frac{|A|^2\hbar k}{m}\,|f(\Omega)|^2\,\frac{\hat{r}}{r^2} = |A|^2 v\,|f(\Omega)|^2\,\frac{\hat{r}}{r^2} \tag{13.11}$$

Si l'on trace autour de la cible une sphère de rayon $r$ très grand, le courant associé au deuxième terme de (13.9) sur la surface de cette sphère est dirigé suivant $\vec{r}$ et vers l'extérieur, et ce terme représente bien une onde sortante. Le courant associé à un terme en $\exp(-\mathrm{i}kr)/r$ est dirigé vers l'intérieur et correspond au contraire à une onde sphérique entrante. Le nombre de particules $\Delta\mathcal{N}(\Omega)$ enregistrées par le détecteur par unité de temps est égal à l'intégrale du courant sur la surface du détecteur $\Delta\mathcal{S} \simeq r^2\Delta\Omega$

$$\Delta\mathcal{N}(\Omega) = \int_{\Delta S} \vec{\jmath}\cdot \mathrm{d}\vec{\mathcal{S}} = r^2 \int_{\Delta\Omega} \vec{\jmath}\cdot\hat{r}\,\mathrm{d}\Omega$$

le détecteur étant placé à une distance $r$ de la cible, ce qui donne pour $\Delta\Omega$ infinitésimal

$$\mathrm{d}\mathcal{N}(\Omega) = |A|^2 v\,|f(\Omega)|^2\,\mathrm{d}\Omega = \mathcal{F}\,|f(\Omega)|^2\,\mathrm{d}\Omega$$

4. Ce terme d'interférences est essentiel pour comprendre le théorème optique (13.54) : *cf.* Lévy-Leblond et Balibar [1984].

C'est bien sûr le comportement en $1/r$ du terme d'onde sphérique sortante qui assure que le flux dans un angle solide donné $\Delta\Omega$ est indépendant de $r$. La définition (13.1) de la section efficace différentielle permet l'identification pour $n_c = 1$

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\Omega)|^2} \tag{13.12}$$

## 13.2 Ondes partielles et déphasages

### 13.2.1 Développement en ondes partielles

Nous avons exposé au § 9.4.1 une méthode de résolution de l'équation de Schrödinger lorsque le potentiel $V(r)$ est à symétrie sphérique. La méthode utilisée consiste à développer la fonction d'onde en harmoniques sphériques suivant (9.77)

$$\psi(r,\theta,\phi) = \sum_{l,m_l} \frac{u_l(r)}{r}\, Y_l^{m_l}(\theta,\phi)$$

La symétrie cylindrique autour de $Oz$ du présent problème permet de se limiter aux termes indépendants de $\phi$ : $m_l = 0$, et compte tenu de la proportionnalité (9.62) entre les harmonique sphériques $m_l = 0$ et les polynômes de Legendre, nous pouvons nous contenter de[5]

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r}\, P_l(\cos\theta) \tag{13.13}$$

où $u_l(r)$ est solution de l'équation radiale (9.78)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right] u_l(r) = E_l u_l(r) \tag{13.14}$$

avec la condition aux limites $u_l(0) = 0$, ou de façon plus précise suivant (9.82)

$$r \to 0 \quad : \quad u_l(r) \propto r^{l+1} \tag{13.15}$$

Commme les polynômes de Legendre forment une base pour les fonctions définies sur l'intervalle $[-1, +1]$, on peut écrire le développement suivant de $f(\theta)$

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(\cos\theta) \qquad f_l = \frac{2l+1}{2}\int_{-1}^{+1} f(\theta) P_l(\cos\theta)\,\mathrm{d}\cos\theta \tag{13.16}$$

Le développement (13.16) est appelé *développement en ondes partielles de l'amplitude de diffusion.*

5. Nous avons modifié la normalisation de $u_l(r)$ d'un facteur sans importance $\sqrt{4\pi/(2l+1)}$ en passant d'une équation à l'autre.

Si $V(r)$ tend vers zéro suffisamment vite[6] pour $r \to \infty$, on peut négliger dans (13.14) $V(r)$ et le terme de barrière centrifuge. Le comportement asymptotique de $u_l(r)$ sera alors

$$r \to \infty \quad : \quad u_l(r) \propto \sin(kr + \hat{\delta}_l)$$

Comparons ce comportement avec celui d'une onde plane. Une onde plane $\exp(\mathrm{i}kz) = \exp(\mathrm{i}kr\cos\theta)$ est une solution à symétrie cylindrique de l'équation de Schrödinger lorsque $V(r) = 0$. On peut donc écrire pour $\exp(\mathrm{i}kz)$ un développement en polynômes de Legendre du type (13.13). Les coefficients de ce développement sont calculés à partir de (13.16) et sont appelés *fonctions de Bessel sphériques* $j_l(kr)$

$$\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kz} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \tag{13.17}$$

Les fonctions de Bessel sphériques s'expriment en fonction de sinus et de cosinus et on montre qu'elles sont données par

$$j_l(x) = (-1)^l x^l \left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^l \frac{\sin x}{x} = (-1)^l x^l \left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^l j_0(x) \tag{13.18}$$

Lorsque $r \to 0$, $rj_l(kr) \propto (kr)^{l+1}$, ce qui est un cas particulier du comportement (13.15) puisque $rj_l(kr)$ est solution de l'équation de Schrödinger radiale avec $V(r) = 0$, tandis que si $r \to \infty$, on montre que[7]

$$r \to \infty \quad : \quad j_l(kr) \simeq \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) \tag{13.19}$$

La comparaison avec le comportement de $u_l(r)$ conduit à définir

$$\delta_l = \hat{\delta}_l - \frac{1}{2}l\pi$$

ce qui permet d'écrire le comportement asymptotique de $u_l(r)$

$$r \to \infty \quad : \quad u_l(r) \simeq a_l \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right) \tag{13.20}$$

Le nombre $\delta_l$ est le *déphasage* dans l'onde partielle $l$, et c'est une fonction de $k$ : $\delta_l(k)$. Afin d'exprimer $f(\theta)$ en fonction des déphasages, il suffit de

6. Cette qualification du potentiel mériterait d'être précisée. Tous les résultats de ce chapitre sont valides si $V(r)$ est de portée finie ($V(r) = 0$ si $r > R$) ou décroît à l'infini plus vite que tout puissance. Si $V(r)$ décroît à l'infini comme $r^{-\alpha}$, certains des résultats ne sont valides que si $\alpha \geq \alpha_0$. La discussion de ce problème est assez technique, et nous renvoyons le lecteur aux ouvrages cités en référence.

7. Voir par exemple Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément $A_{\mathrm{VIII}}$.

comparer les développements asymptotiques $r \to \infty$ de (13.9) et de (13.13) en choisissant $A = 1$. Compte tenu de (13.17), le développement (13.9) s'écrit

$$\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kz} + f(\theta)\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r} = \sum_{l=0}^{\infty} X_l(r)\,P_l(\cos\theta)$$

$$X_l(r) = (2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr) + f_l\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}$$

La forme asymptotique (13.19) de $j_l$ donne

$$\mathrm{i}^l j_l(kr) \simeq \frac{1}{2\mathrm{i}kr}\,\left[(-1)^{l+1}\mathrm{e}^{\,-\mathrm{i}kr} + \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}\right]$$

et on en déduit

$$X_l = \frac{2l+1}{2\mathrm{i}kr}\left[(-1)^{l+1}\mathrm{e}^{\,-\mathrm{i}kr} + \left(1 + \frac{2\mathrm{i}k}{2l+1}\,f_l\right)\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}\right] \tag{13.21}$$

La fonction $X_l(r)$ doit être asymptotiquement égale à $u_l(r)/r$ qui vaut, d'après (13.20)

$$\frac{u_l(r)}{r} \simeq \frac{a_l}{2\mathrm{i}r}\,\left[(-1)^{l+1}\mathrm{e}^{\,-\mathrm{i}kr} + \mathrm{e}^{\,2\mathrm{i}\delta_l}\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}\right] \tag{13.22}$$

L'égalité de (13.21) et (13.22) n'est possible que si

$$\mathrm{e}^{\,2\mathrm{i}\delta_l} = 1 + \frac{2\mathrm{i}k}{2l+1}\,f_l$$

soit

$$f_l = \frac{2l+1}{2\mathrm{i}k}\left(\mathrm{e}^{\,2\mathrm{i}\delta_l} - 1\right) = \frac{2l+1}{k}\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l \tag{13.23}$$

Cette équation donne l'expression recherchée de $f(\theta)$ en fonction des déphasages

$$\boxed{f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)} \tag{13.24}$$

On déduit la section efficace différentielle de (13.12) et la section efficace totale par intégration sur les angles, en utilisant la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre déduite de (9.62) et de l'orthogonalité (9.55) des harmoniques sphériques.

$$\int \mathrm{d}\Omega\,P_l(\cos\theta)\,P_{l'}(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1}\,\delta_{ll'}$$

Le résultat pour $\sigma_{\text{tot}}$ s'écrit

$$\boxed{\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2}\,\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l} \tag{13.25}$$

La fonction

$$\boxed{S_l(k) = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l(k)}} \tag{13.26}$$

où nous avons explicité la dépendance en $k$, est appelée *élément de matrice $S$ dans l'onde partielle $l$*, et joue un rôle important, que l'on peut comprendre en comparant les comportements (13.21) et (13.22) de l'onde sphérique libre $j_l(kr)$ et de la fonction d'onde en présence d'un potentiel

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\propto \left[(-1)^{l+1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right] \\ u_l(r) &\propto \left[(-1)^{l+1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr} + \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right] \end{aligned}$$

L'effet du potentiel est de multiplier la partie onde sphérique sortante par le facteur de phase $S_l = \exp(2\mathrm{i}\delta_l)$, l'onde entrante n'étant pas affectée, ce qui résulte des conditions aux limites imposées. En effet, l'onde plane incidente est composée d'une onde sphérique entrante et d'une onde sphérique sortante. La partie sortante est modifiée par la diffusion, car les particules sont diffusées par la cible et divergent à partir de celle-ci, mais ce n'est pas le cas de l'onde entrante qui n'est pas modifiée par l'interaction avec la cible. Nous montrerons au § 13.3.1 que la condition $|S_l| = 1$ rend compte du fait que le nombre de particules entrantes dans une sphère de grand rayon tracée autour de la cible est égal à celui des particules sortantes lorsque la diffusion est élastique.

Chaque terme de (13.25) correspond à la section efficace de diffusion dans l'onde partielle $l$. Évidemment, l'identification de la contribution de chaque onde partielle n'est possible que pour la section efficace totale, car les diverses ondes partielles interfèrent dans la section efficace différentielle. On remarque que la contribution à la section efficace totale de chaque onde partielle est bornée

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}\,(2l+1)\sin^2\delta_l \leq \sigma_l^{\max} = \frac{4\pi}{k^2}\,(2l+1) \tag{13.27}$$

Donnons une interprétation semi-classique de ce résultat. Classiquement, le moment angulaire $\hbar l$ et le paramètre d'impact sont reliés par $l = kb$ et par conséquent

$$\frac{l}{k} \leq b \leq \frac{l+1}{k}$$

La section efficace classique maximale est l'aire comprise entre les cercles de rayons $l$ et $l+1$

$$\sigma_l \leq \frac{\pi}{k^2}\,\left[(l+1)^2 - l^2\right] = \frac{\pi}{k^2}\,(2l+1) = \frac{1}{4}\,\sigma_l^{\max}$$

La section efficace *classique* est au maximum le quart de la section maximale quantique. Supposons que le potentiel ait une portée limitée : $V(r) = 0$ si $r > R$. Alors, d'un point de vue classique, une particule incidente ne pourra interagir que si son paramètre d'impact est inférieur à $R$ : $b < R$, et seules les ondes partielles telles que $l \lesssim kR$ vont contribuer. On voit que la méthode des déphasages sera performante si l'énergie est faible, car dans ce cas seul un

nombre limité d'ondes partielles vont contribuer. En particulier, seule l'onde $s$ ($l = 0$) va donner une contribution appréciable lorsque $k \to 0$. Une version plus précise de cet argument consiste à remarquer que la probabilité de présence dans la couronne sphérique $[r, r + \mathrm{d}r] \propto r^2 j_l^2(kr)$ d'une onde sphérique libre est négligeable pour $kr \lesssim [l(l+1)]^{1/2}$ et cette onde ne pénètre pas dans les régions où le potentiel est important pour les petites valeurs de $k$, sauf si $l = 0$, auquel cas $j_0^2(kr) \propto$ cste si $r \to 0$. On montre rigoureusement[8] que pour un potentiel de portée limitée $R$, le déphasage $\delta_l$ se comporte comme

$$\delta_l(k) \propto (kR)^{2l+1} \tag{13.28}$$

lorsque $k \to 0$, ou $l \to \infty$.

### 13.2.2 Diffusion à basse énergie

Lorsque le potentiel est de portée limitée, l'onde $s$ sera la seule à contribuer de façon appréciable à la section efficace de basse énergie, et celle-ci sera par conséquent isotrope. Jusqu'à la fin de cette section, nous prendrons en compte uniquement l'onde $l = 0$ et nous utiliserons les notations $\delta_{l=0} = \delta(k)$, $S_{l=0}(k) = S(k)$, $f_{l=0}(k) = f(k)$, $u_{l=0}(r) = u(r)$. Compte tenu du comportement (13.28) pour $l = 0$, $\delta(k) \propto k$, on définit la *longueur de diffusion a* par

$$\boxed{a = -\lim_{k\to 0} \frac{\delta(k)}{k}} \tag{13.29}$$

Le signe $(-)$ est conventionnel et cette convention sera justifiée ci-dessous.

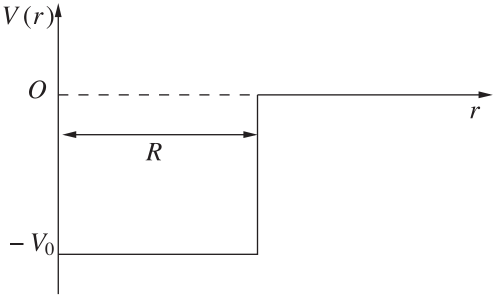



FIG. 13.4 – Puits sphérique.

Comme exemple de calcul de déphasage et de longueur de diffusion, nous allons traiter le cas du puits sphérique (figure 13.4)

$$\begin{aligned} V(r) &= -V_0 \qquad & 0 \le r \le R \\ V(r) &= 0 \qquad & r > R \end{aligned}$$

8. Voir par exemple Messiah [1959], chapitre X.

Ce puits sphérique décrit approximativement la diffusion neutron-proton avec les paramètres suivants (exercices 9.7.8 et 13.5.3)

$$R \simeq 2 \text{ fm} \qquad V_0 \simeq 26\,\text{MeV}$$

L'équation de Schrödinger radiale s'écrit

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\,V(r)\right)u(r) = \frac{2m}{\hbar^2}\,Eu(r) \tag{13.30}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} r > R \quad &: \quad \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + k^2\right)u(r) = 0 \\ r < R \quad &: \quad \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + {k'}^2\right)u(r) = 0 \end{aligned}$$

avec $k^2 = 2mE/\hbar^2$ et ${k'}^2 = 2m(E+V_0)/\hbar^2$, d'où, en tenant compte de la condition $u(r=0)=0$

$$\begin{aligned} r > R \quad &: \quad u(r) = C\sin(kr+\delta) \\ r < R \quad &: \quad u(r) = D\sin k'r \end{aligned}$$

La continuité de la dérivée logarithmique de $u(r)$ à $r = R$ impose

$$k'\cot k'R = k\cot(kR+\delta) \tag{13.31}$$

L'équation

$$\cot x = \mathrm{i}\,\frac{\mathrm{e}^{\,2\mathrm{i}x}+1}{\mathrm{e}^{\,2\mathrm{i}x}-1}$$

permet de déterminer l'élément de matrice $S$, $S(k)$ ; après un calcul sans difficulté, on trouve

$$S(k) = \mathrm{e}^{\,2\mathrm{i}\delta(k)} = \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}kR}\;\frac{\cos k'R + \mathrm{i}\dfrac{k}{k'}\,\sin k'R}{\cos k'R - \mathrm{i}\dfrac{k}{k'}\sin k'R} \tag{13.32}$$

L'expression donnant $S(k)$ est bien de module unité. Évidemment, le déphasage n'est déterminé qu'à $\pi$ près : pour avoir la “vraie” valeur du déphasage, il faudrait faire croître le potentiel de 0 à $V_0$ et suivre l'évolution de $\delta$ entre zéro et sa valeur finale.

Comme dans le cas unidimensionnel (*cf.* § 8.3.4), *il existe une relation remarquable entre la matrice S et les états liés*. Posons en effet $k = \mathrm{i}\kappa$ (on verra dans un instant qu'il faut choisir $k = \mathrm{i}\kappa, \kappa > 0$, et non $k = -\mathrm{i}\kappa$). La fonction $S(k)$ a des pôles pour

$$\cos k'R + \frac{\kappa}{k'}\,\sin k'R = 0 \tag{13.33}$$

mais cette équation est précisément celle qui détermine les états liés. En effet, la fonction d'onde d'un état lié d'énergie $E = -B < 0$ est donnée par

$$\begin{aligned} r > R \quad &: \quad u(r) = C\mathrm{e}^{-\kappa r} \\ r < R \quad &: \quad u(r) = D\sin k'r \end{aligned}$$

avec $\kappa = (2mB/\hbar^2)^{1/2}$, $k' = [2m(V_0 + B)]^{1/2}/\hbar$, et la continuité de la dérivée logarithmique à $r = R$ s'écrit

$$-\kappa = k' \cot k'R \tag{13.34}$$

ce qui est exactement l'équation donnant les pôles de $S(k)$. Le résultat est général pour les potentiels décroissant suffisamment vite à l'infini et il est valable pour toute onde partielle : les pôles de $S_l(k)$ pour $k = \mathrm{i}\kappa$ donnent la position des états liés dans l'onde partielle $l$.

Il est facile de déduire la longueur de diffusion de (13.31) ; cette équation s'écrit aussi

$$\tan(kR + \delta) = \frac{k}{k'} \tan k'R$$

Dans la limite $k \to 0$, $kR \to 0$, $\delta \to 0$ et $k' \to k_0 = (2mV_0/\hbar^2)^{1/2}$, d'où

$$kR + \delta(k) \simeq \frac{k}{k_0} \tan k_0 R$$

soit

$$\delta(k) \simeq -k\left(R - \frac{\tan k_0 R}{k_0}\right)$$

ce qui donne d'après la définition (13.29)

$$a = R\left(1 - \frac{\tan k_0 R}{k_0 R}\right) \tag{13.35}$$

Un autre cas particulier intéressant est celui de la diffusion par une sphère dure : $V(r) = 0$ si $r > R$ et $V(r) = +\infty$ si $r < R$. La fonction d'onde radiale $u(r)$ doit s'annuler à $r = R$

$$\begin{aligned} r > R \quad &: \quad u(r) = C\sin(kR + \delta) \\ r < R \quad &: \quad u(r) = 0 \end{aligned}$$

et donc $kR + \delta = n\pi$ et pour $k$ suffisamment petit

$$\delta = -kR \qquad\qquad a = R \tag{13.36}$$

Le signe $(-)$ dans la définition (13.29) a été choisi de sorte que la longueur de diffusion d'une sphère dure soit $+R$ et non $-R$. L'étude qualitative du comportement de $u(r)$ sur la figure 13.5 montre que $a > 0$ pour tout potentiel répulsif. La situation est plus complexe pour un potentiel attractif. Lorsqu'il

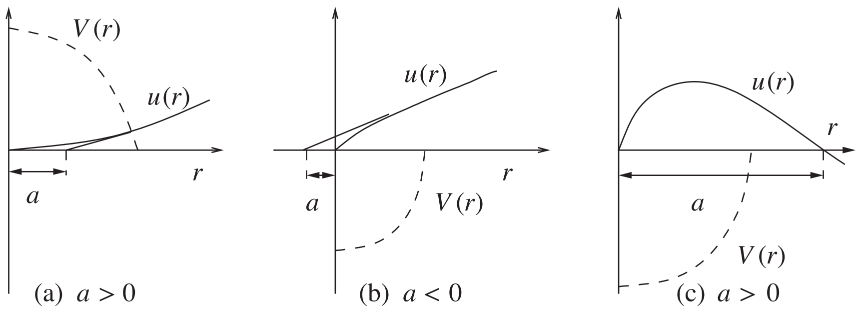



FIG. 13.5 – Comportement de la fonction d'onde et de la longueur de diffusion pour différents potentiels. (a) Potentiel répulsif. (b) Potentiel attractif sans état lié. (c) Potentiel attractif avec un seul état lié.

n'existe pas d'état lié, un potentiel attractif donne une longueur de diffusion négative. L'apparition d'un état lié change le signe de $a$, qui devient positif. Le signe change à nouveau avec l'apparition d'un second état lié, etc. Ceci est confirmé par (13.35) : la condition d'apparition d'un premier état lié est $k_0R = \pi/2$ et la longueur de diffusion est négative pour $0 < k_0R < \pi/2$. Elle devient infinie lorsque $k_0R = \pi/2$, positive lorsque $k_0R > \pi/2$ et le reste pour $\pi/2 < k_0R < 3\pi/2$. L'apparition d'un second état lié correspond à $k_0R = 3\pi/2$, et la longueur de diffusion devient à nouveau négative au-delà de cette valeur après être passée à nouveau par une valeur infinie. Une longueur de diffusion grande et positive signale la présence d'un état lié de faible énergie et si elle est grande et négative, elle signale la proximité de l'apparition d'un état lié : on dit parfois qu'il existe un état anti-lié ou virtuel.

La section efficace de basse énergie est isotrope d'après (13.12), et la section efficace totale est

$$\sigma_{\text{tot}} = 4\pi a^2 \tag{13.37}$$

Il est intéressant de remarquer que la section efficace quantique d'une sphère dure ($a = R$) est quatre fois la section efficace classique $\pi R^2$. La mesure de la section efficace totale ne donne que la valeur absolue de $a$. Or le *signe* de la longueur de diffusion est une donnée importante : par exemple, le potentiel effectif que nous allons définir au paragraphe suivant est attractif pour $a < 0$ et répulsif pour $a > 0$, ce qui a des conséquences directes par exemple sur la possibilité de former des condensats de Bose-Einstein atomiques gazeux (section 14.4). Un autre cas important est celui de la diffusion neutron-proton (§ 13.2.4).

La forme de basse énergie $\delta(k) \simeq -ka$ est, en fait, le premier terme d'un développement du déphasage en fonction de $k^2$. L'exercice 13.6.3 montre que la fonction $k \cot \delta(k)$ est une fonction analytique[9] de $k^2$ dont on peut écrire

---

9. Si $V(r)$ décroît au moins aussi vite que $\exp(-\mu r)$. L'équation (13.38) est valable pourvu que $V(r)$ décroisse au moins comme $r^{-5}$.

le développement de Taylor pour $k^2 \to 0$

$$k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2}\, r_0 k^2 + O(k^4) \tag{13.38}$$

La longueur $r_0$ est appelée *portée effective*. On utilise souvent la forme de basse énergie de l'amplitude de diffusion

$$f(k) = \frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta(k)} - 1}{2\mathrm{i}k} = \frac{1}{k[\cot \delta(k) - \mathrm{i}]}$$

soit, en exprimant $\cot \delta(k)$ en fonction de $a$ si $r_0 k \ll 1$

$$\boxed{f(k) = \frac{-a}{1 + \mathrm{i}ka}} \tag{13.39}$$

Cette forme peut être rendue plus précise si l'on utilise l'approximation de portée effective (13.38)

$$f(k) = \frac{-a}{1 + \mathrm{i}ka - \frac{1}{2}\, r_0 a k^2} \tag{13.40}$$

### 13.2.3 Potentiel effectif

La longueur de diffusion permet d'introduire la notion très utile de potentiel effectif. Lorsque l'on considère un sytème de particules de basse énergie, il est souvent commode de pouvoir remplacer le potentiel réel $V(r)$ par un potentiel $V_{\rm eff}(r)$ plus simple, appelé *potentiel effectif*, ou *pseudo-potentiel*, qui donne les mêmes résultats pour la diffusion de basse énergie. Ce potentiel effectif est utilisé, par exemple, dans le traitement théorique de la diffusion de neutrons de basse énergie ou des condensats de Bose-Einstein atomiques gazeux (section 14.4). Nous allons montrer que la diffusion de basse énergie est reproduite en choisissant un potentiel effectif proportionnel à une fonction $\delta$

$$V_{\rm eff}(r)\psi(r) = g\delta(\vec{r})\, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\, (r\psi(r)) \tag{13.41}$$

où $g$ est une constante à déterminer. Pour justifier ce potentiel et déterminer $g$, examinons l'équation de Schrödinger pour une fonction d'onde $\psi(r) = u(r)/r$. L'expression du laplacien appliqué à une fonction de $r$

$$\nabla^2 f(r) = \frac{1}{r}\, \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\, (rf(r)) \tag{13.42}$$

n'est valable que pour une fonction $f(r)$ *régulière* à $r = 0$, tandis que pour $f(r) \propto 1/r$, on utilise l'équation familière en électrostatique

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r}) \tag{13.43}$$

Examinons l'équation de Schrödinger en prenant comme potentiel (13.41)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\frac{u(r)}{r}+V_{\rm eff}(r)\,\frac{u(r)}{r}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\,\frac{u(r)}{r}$$

et écrivons le terme d'énergie cinétique

$$\begin{aligned}\nabla^2\frac{u(r)}{r}&=\nabla^2\left[\frac{u(r)-u(0)}{r}\right]+u(0)\nabla^2\frac{1}{r}\\&=\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\,r\left[\frac{u(r)-u(0)}{r}\right]-4\pi u(0)\delta(\vec{r})=\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2}-4\pi u(0)\delta(\vec{r})\end{aligned}$$

où nous avons remarqué que $[u(r)-u(0)]/r$ est une fonction régulière à $r=0$ pour calculer le laplacien. En outre, si l'on écrit

$$u(r)=a+br+cr^2+\cdots$$

alors

$$\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}=\frac{2c}{r}+\cdots$$

et l'intégrale de ce terme dans une sphère de rayon $R$ autour de l'origine tend vers zéro avec $R$. Nous avons donc

$$-\frac{\hbar^2}{2mr}\,\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2}-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\,\frac{u(r)}{r}=\left[-\frac{4\pi\hbar^2}{2m}\,u(0)-gu'(0)\right]\delta(\vec{r})$$

Les deux membres de l'équation précédente doivent s'annuler séparément, ce qui implique, pour le membre de gauche

$$u(r)=C\sin(kr+\delta(k))\qquad\qquad r>0$$

et donc $u'(0)/u(0)=k\cot\delta(k)$. L'annulation du coefficient de $\delta(\vec{r})$ impose

$$-\frac{2\pi\hbar^2}{m}=gk\cot\delta(k)$$

et la limite $k\to 0$ de cette équation permet de relier[10] $g$ et $a$

$$\boxed{g=\frac{2\pi\hbar^2}{m}\,a\qquad\qquad V_{\rm eff}(\vec{r})=\frac{2\pi\hbar^2a}{m}\,\delta(\vec{r})\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\,r}\tag{13.44}$$

Le potentiel effectif dépend d'un seul paramètre, la longueur de diffusion $a$, que l'on prend bien sûr égale à celle d'un potentiel plus réaliste ou tout simplement

10. Il faut se rappeler que si l'on considère la diffusion de particules identiques de masse $M$, la masse réduite $m=M/2$ et

$$g=\frac{4\pi\hbar^2}{M}\,a$$

de l'expérience. Examinons aussi les états liés du potentiel effectif. La fonction d'onde radiale de cet état lié doit être de la forme

$$u(r) = C\mathrm{e}^{-\kappa r}$$

et par conséquent $u'(0)/u(0) = -\kappa$. On en déduit une relation entre l'énergie de liaison $B$ et la longueur de diffusion

$$\kappa = \sqrt{\frac{2mB}{\hbar^2}} = \frac{2\pi\hbar^2 g}{m} = \frac{1}{a} \tag{13.45}$$

L'état lié du potentiel effectif est unique, et on retrouve le fait que $a > 0$ si l'on veut un état lié et un seul. En résumé, un potentiel effectif tel que $a > 0$ correspond aussi bien à une sphère dure qu'à un potentiel attractif possédant un seul état lié. Ces deux potentiels donneront le même comportement pour un ensemble de particules de basse énergie, alors que le comportement sera différent si $a < 0$ : c'est le *signe* de la longueur de diffusion qui est crucial. La fonction $k \cot \delta(k)$ est une constante

$$k \cot \delta(k) = -\frac{2\pi\hbar^2}{mg} = -\frac{1}{a}$$

et l'amplitude de diffusion du potentiel effectif est donnée *exactement* par (13.39)

$$f_{\mathrm{eff}}(k) = \frac{-a}{1 + \mathrm{i}ka}$$

### 13.2.4 Diffusion neutron-proton à basse énergie

La diffusion neutron-proton à basse énergie fournit une illustration d'une grande importance pratique du formalisme que nous venons de développer, l'autre application importante étant celle aux condensats de Bose-Einstein. Le proton et le neutron sont des particules de spin 1/2, et comme la diffusion dépend du spin, nous devons généraliser les résultats précédents pour en tenir compte. Dans la diffusion à basse énergie, le spin total $\vec{S}_{\mathrm{tot}}$ est conservé. En effet, le moment angulaire orbital est nul, puisque la diffusion se fait dans l'onde $s$, et la conservation du moment angulaire total est équivalente à celle du spin total. L'amplitude de diffusion peut s'écrire comme un opérateur $\hat{f}$ agissant dans l'espace $\mathcal{H}$ à quatre dimensions, produit tensoriel des espaces des états des deux spins 1/2, en fonction des projecteurs $\mathcal{P}_s = \mathcal{P}_0$ et $\mathcal{P}_t = \mathcal{P}_1$ sur les états singulet (spin total zéro) et triplets (spin total un) donnés en (9.128)

$$\hat{f}(k) = f_s(k)\mathcal{P}_s + f_t(k)\mathcal{P}_t$$

Cette écriture de $\hat{f}$ assure que le spin total est inchangé dans la diffusion : un état singulet reste singulet et un état triplet reste triplet. Nous allons nous limiter au cas $ka \ll 1$, et d'après (13.39)

$$f_s(k) = -a_s \qquad f_t(k) = -a_t$$

où $a_s$ et $a_t$ sont les longueurs de diffusion dans l'état singulet et l'état triplet. Lorsque la condition $ka \ll 1$ n'est pas satisfaite, il est possible d'utiliser des expressions analogues à (13.39), ou mieux (13.40), pour $f_s(k)$ et $f_t(k)$, en faisant intervenir les portées effectives $r_{0s}$ et $r_{0t}$. En résumé, à l'approximation où $ka \ll 1$

$$\hat{f} = -a_s \mathcal{P}_s - a_t \mathcal{P}_t \tag{13.46}$$

ou encore, en introduisant les matrices de Pauli $\vec{\sigma}_p$ et $\vec{\sigma}_n$ agissant dans l'espace des états de spin du proton et du neutron

$$-\hat{f} = \hat{a} = \frac{1}{4}(a_s + 3a_t)I + \frac{1}{4}(a_t - a_s)\vec{\sigma}_p \cdot \vec{\sigma}_n \tag{13.47}$$

La section efficace différentielle est isotrope et la section efficace totale pour un état de spin initial $|i\rangle$ et un état final $|f\rangle$ est

$$\sigma_{fi} = 4\pi |\langle f|\hat{a}|i\rangle|^2 \tag{13.48}$$

Si on ne mesure pas les spins finaux et si l'état initial est un mélange où l'on connaît seulement la probabilité $\mathsf{p}_i$ de trouver les spins initiaux dans l'état $|i\rangle$, il faut sommer sur les états $|f\rangle$ et les probabilités $\mathsf{p}_i$

$$\begin{aligned}\sigma &= 4\pi \sum_i \mathsf{p}_i \sum_f \langle i|\hat{a}|f\rangle\langle f|\hat{a}|i\rangle \\ &= 4\pi \sum_i \mathsf{p}_i \langle i|\hat{a}^2|i\rangle = 4\pi\,\mathrm{Tr}\,(\rho_{\text{init}}\,\hat{a}^2)\end{aligned}$$

où nous avons utilisé la relation de fermeture dans $\mathcal{H}$, $\sum_f |f\rangle\langle f| = I$, et la définition de l'opérateur statistique de l'état initial

$$\rho_{\text{init}} = \sum_i \mathsf{p}_i |i\rangle\langle i|$$

Le cas le plus fréquent est celui où l'état initial est non polarisé : les états $|{+}{+}\rangle$, $|{+}{-}\rangle$, $|{-}{+}\rangle$ et $|{-}{-}\rangle$ ont la même probabilité. Dans ce cas, $\rho_{\text{init}} = I/4$ et

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{non pol}} &= \pi\,\mathrm{Tr}\,\hat{a}^2 = \pi\,\mathrm{Tr}\left(a_s^2\mathcal{P}_s + a_t^2\mathcal{P}_t\right) \\ &= 4\pi\left(\frac{1}{4}\,a_s^2 + \frac{3}{4}\,a_t^2\right) = \frac{1}{4}\,\sigma_s + \frac{3}{4}\,\sigma_t\end{aligned} \tag{13.49}$$

L'interprétation physique est immédiate : si l'état initial est non polarisé, la probabilité d'avoir un état singulet est de $1/4$ et celle d'avoir un état triplet de $3/4$, ce qui donne les poids $1/4$ et $3/4$ aux sections efficaces singulet et triplet dans (13.49).

La section efficace non polarisée ne donne accès qu'à la combinaison $a_s^2 + 3a_t^2$ des longueurs de diffusion. Une information supplémentaire vient

de l'existence d'un état lié dans l'état triplet, le deutéron, ce qui permet de déterminer approximativement $a_t$. Une relation précise entre les paramètres du deutéron et ceux de la diffusion à basse énergie dans l'état triplet est établie dans l'exercice 13.6.3, à l'approximation de la portée effective. Une relation approchée est obtenue en remarquant que la fonction d'onde du deutéron s'étend très au-delà de la portée du potentiel, $\kappa^{-1} \gg R$, ce qui permet d'utiliser un potentiel effectif et la relation (13.45). Compte tenu de $B \simeq 2.22\,\mathrm{MeV}$, on trouve $\kappa^{-1} \simeq 4.2$ fm, alors que la valeur exacte de $a_t$ est de 5.4 fm, mais l'argument suffit pour déterminer le signe de $a_t$ : $a_t > 0$.

La connaissance de $a_t$ à partir des paramètres du deutéron et la mesure de la section efficace non polarisée permettent de déterminer le module $|a_s|$ de la longueur de diffusion dans l'état singulet, mais pas son signe. Une méthode possible pour déterminer le signe de $a_s$ est la diffusion de neutrons sur une molécule d'hydrogène, étudiée à l'exercice 13.6.2, qui montre que la longueur de diffusion $a_s$ est négative, en accord avec le fait qu'il n'existe pas d'état lié singulet. Les valeurs expérimentales des longueurs de diffusion et des portées effectives sont

$$a_t = 5.40\,\mathrm{fm} \qquad r_{0t} = 1.73\,\mathrm{fm} \qquad a_s = -23.7\,\mathrm{fm} \qquad r_{0s} = 2.5\,\mathrm{fm}$$

On constate que $a_s$ est grande et négative, et le système neutron-proton dans l'état singulet est très proche de la formation d'un état lié : il existe un état virtuel.

## 13.3 Diffusion inélastique

### 13.3.1 Théorème optique

En règle générale, dans une collision, les particules peuvent non seulement être diffusées élastiquement, mais aussi inélastiquement ; par exemple, la diffusion d'un photon sur un atome $A$ dans son état fondamental $E_0$ peut laisser l'atome dans un niveau excité $A^*$ d'énergie $E_1$

$$\gamma + A \to \gamma' + A^*$$

le photon final ayant perdu une énergie $(E_1 - E_0)$ par rapport au photon initial (si l'on néglige le recul de l'atome). Il est même possible que les particules finales soient différentes des particules initiales, comme dans

$$\pi^- + p \to K^0 + \Lambda$$

ou

$$\pi^- + p \to \pi^- + \pi^0 + p$$

Dans le cas de la diffusion élastique, nous avons vu que $|S_l(k)| = 1$. Nous allons montrer qu'il est possible de généraliser l'expression de l'amplitude

diffusion $f(\Omega)$ au cas inélastique à condition d'admettre que $|S_l(k)| \leq 1$. Cette condition découle de ce que le module de l'amplitude de l'onde sortante doit être plus petit que celui de l'onde entrante : le nombre de particules $N_{\rm in}$ entrant dans une sphère de grand rayon $r$ tracée autour de la cible doit être supérieur à celui $N_{\rm out}$ qui en sort, puisque les particules incidentes peuvent seulement *disparaître* dans la diffusion inélastique. Comme nous le montrons ultérieurement, cette inégalité vaut pour toute onde partielle : $N^l_{\rm out} \leq N^l_{\rm in}$, car l'intégration sur la surface de la sphère élimine les interférences entre ondes partielles. Si la diffusion est purement élastique dans l'onde $l$, $N^l_{\rm in} = N^l_{\rm out}$ et $|S_l(k)| = 1$. Évaluons $N^l_{\rm in}$ et $N^l_{\rm out}$ en revenant à l'expression asymptotique $r \to \infty$ (13.22) de la fonction d'onde. Comme dans la diffusion élastique, seul le terme d'onde sortante peut être modifié

$$\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r} \to S_l(k)\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}$$

d'où le comportement asymptotique de $\psi(\vec{r})$

$$\psi \simeq \frac{\mathrm{i}A}{2kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\left[(-1)^l\mathrm{e}^{\,-\mathrm{i}kr} - S_l\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}\right]$$

ce qui donne pour $f(\theta)$

$$f(\theta) = \frac{1}{2\mathrm{i}k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)(S_l - 1)$$

La section efficace élastique totale vaut

$$\sigma_{\rm el} = \int \mathrm{d}\Omega |f(\theta)|^2$$

et le résultat de l'intégration sur $\Omega$ généralise (13.25)

$$\boxed{\sigma_{\rm el} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|1 - S_l|^2} \tag{13.50}$$

Calculons le nombre de particules entrantes dans l'onde partielle $l$, $N^l_{\rm in}$, en intégrant le courant entrant sur la surface d'une sphère de rayon $r \to \infty$ autour de la cible. Comme les polynômes de Legendre sont orthogonaux, il n'y a pas de termes d'interférences entre les différentes ondes partielles. On trouve

$$N^l_{\rm in} = \left[\frac{(2l+1)^2|A|^2}{4k^2}\right]\left[\frac{2}{2l+1}\right]\left[\frac{\hbar k}{m}\right][2\pi] = \frac{\pi\hbar(2l+1)|A|^2}{mk}$$

Le premier terme vient de la normalisation de $|\psi|^2$, le second de la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre, le troisième de l'expression du

courant de l'onde entrante et le dernier de l'intégration sur l'angle azimutal $\phi$. Un calcul analogue donne $N^l_{\rm out}$

$$N^l_{\rm out} = \frac{\pi\hbar(2l+1)|A|^2}{mk}\,|S_l|^2$$

La condition $N^l_{\rm out} \le N^l_{\rm in}$ implique que $|S_l| \le 1$. La section efficace inélastique dans l'onde partielle $l$ n'est autre, au facteur de flux $\mathcal{F} = \hbar k|A|^2/m$ près, que la différence entre le nombre de particules entrantes et celui de particules sortantes

$$\sigma^l_{\rm inel} = \frac{1}{\mathcal{F}}\left(N^l_{\rm in} - N^l_{\rm out}\right) = \frac{\pi\hbar(2l+1)|A|^2}{k^2}(1-|S_l|^2)$$

et la section efficace inélastique totale vaut

$$\boxed{\sigma_{\rm inel} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-|S_l|^2)} \tag{13.51}$$

Si $N^l_{\rm in} = N^l_{\rm out}$, le nombre de particules sortantes est égal au nombre de particules entrantes, la diffusion est élastique dans l'onde partielle $l$ et $|S_l(k)| = 1$, $S_l(k) = \exp[2{\rm i}\delta_l(k)]$. La condition $|S_l| \le 1$ entraîne comme il se doit $\sigma^l_{\rm inel} \ge 0$. La somme des sections efficaces élastique et inélastique est la section efficace totale

$$\boxed{\sigma_{\rm tot} = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-{\rm Re}\,S_l)} \tag{13.52}$$

La présence de voies inélastiques implique que $(1-S_l) \ne 0$, et *on ne peut donc pas avoir en physique quantique de diffusion purement inélastique*, alors qu'en physique classique des particules peuvent être envoyées sur des cibles parfaitement absorbantes, sans diffusion élastique. Si l'absorption est totale dans une onde partielle $l$, ce qui correspond à $N^{\rm out}_l = 0$ et donc à $S_l = 0$, alors

$$\sigma_{\rm el} = \sigma^l_{\rm inel} = \frac{\pi}{k^2}\,(2l+1) \tag{13.53}$$

Par comparaison, la section efficace élastique maximale est

$$\sigma^l_{\rm el,max} = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)$$

Une conséquence importante de l'imbrication entre diffusions élastique et inélastique est le théorème optique. Calculons la partie imaginaire de l'amplitude de diffusion vers l'avant[11], ${\rm Im} f(\theta=0)$ en utilisant $P_l(1) = 1$

$${\rm Im} f(\theta=0) = \frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-\,{\rm Re} S_l)$$

11. Cette quantité ne peut pas être mesurée directement, car vers l'avant on trouve principalement les particules incidentes qui n'ont pas subi de collision. Il faut prendre la limite $\theta \to 0$ de $f(\theta)$. Voir aussi la note 4.

et si l'on compare avec l'expression (13.52) de $\sigma_{\rm tot}$

$$\boxed{\sigma_{\rm tot} = \frac{4\pi}{k}\ {\rm Im} f(\theta = 0)} \tag{13.54}$$

Cete relation est le *théorème optique*, qui relie la section efficace totale à la partie imaginaire de la diffusion vers l'avant. La démonstration du théorème met en évidence qu'il découle de la conservation de la probabilité.

## 13.3.2 Potentiel optique

On peut rendre compte de la diffusion inélastique en introduisant un potentiel complexe dans l'équation de Schrödinger. En effet, si l'on reprend la démonstration du § 8.2.2 de l'équation de continuité du courant $\vec{\nabla}\cdot\vec{\jmath} = 0$ dans le cas d'une onde stationnaire $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$, on s'aperçoit que cette équation n'est pas satisfaite si le potentiel est complexe

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{\jmath} = \frac{2}{\hbar}\ {\rm Im}\, V(\vec{r})|\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 \tag{13.55}$$

On retrouve naturellement le résultat $\vec{\nabla}\cdot\vec{\jmath} = 0$ dans le cas du potentiel réel utilisé au § 8.2.2. Le nombre de particules absorbées par unité de temps est égal au flux incident multiplié par la section efficace inélastique. Pour calculer le nombre de particules absorbées, entourons la cible par une sphère de grand rayon et calculons le flux de $\vec{\jmath}$ à travers la surface $\mathcal{S}$ de cette sphère

$$-\int_{\mathcal{S}} \vec{\jmath}\cdot {\rm d}\vec{\mathcal{S}} = -\int_{\mathcal{V}} \vec{\nabla}\cdot\vec{\jmath}\, {\rm d}^3 r = -\frac{2}{\hbar}\int_{\mathcal{V}} {\rm Im}\, V(\vec{r})|\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2\, {\rm d}^3 r$$

où $\mathcal{V}$ est le volume de la sphère et le signe $(-)$ correspond au fait que ${\rm d}\vec{\mathcal{S}}$ est orienté vers l'extérieur. On a donc

$$\sigma_{\rm in} = -\frac{2m}{\hbar^2 k}\int {\rm Im}\, V(\vec{r})|\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2\, {\rm d}^3 r \tag{13.56}$$

où nous avons intégré sur tout l'espace car le potentiel est supposé de portée finie ou s'annulant suffisamment vite à l'infini. Jusqu'à la fin de cette section, le potentiel $V(\vec{r})$ est quelconque : il n'est pas nécessairement invariant par rotation. L'équation (13.56) implique que la partie imaginaire de $V(\vec{r})$ doit être négative : ${\rm Im}V(\vec{r}) \leq 0$. Le potentiel complexe $V(\vec{r})$ de partie imaginaire négative est appelé *potentiel optique*. Ce potentiel est utile lorsque l'on ne s'intéresse pas aux détails des processus inélastiques, mais seulement à leur répercussion sur les processus élastiques. Il est en particulier très largement utilisé dans la diffusion neutron-noyau. À basse énergie, on pourra représenter ce potentiel complexe par un potentiel effectif du type (13.41) avec une longueur de diffusion complexe $a = a_1 + {\rm i}a_2,\ a_2 < 0$. Dans ces conditions,

$\mathrm{Im}\, f = -a_2$ et la section efficace totale est très grande par rapport à la section efficace élastique

$$\sigma_{\mathrm{tot}} \simeq \sigma_{\mathrm{in}} \simeq \frac{4\pi}{k}\,|a_2| \gg \sigma_{\mathrm{el}} = 4\pi a_1^2$$

La proportionalité de $\sigma_{\mathrm{in}}$ à $1/k$, ou bien à $1/v$, où $v$ est la vitesse des neutrons incidents, est un résultat d'une très grande importance : *la section efficace d'absorption des neutrons lents croît en* $1/v$ *quand* $v \to 0$. Ceci entraîne, par exemple, que l'on doit ralentir les neutrons pour obtenir des section efficaces importantes de fission de l'uranium dans un réacteur nucléaire. Un autre exemple est l'utilisation du cadmium pour absorber les neutrons : la longueur de diffusion est complexe, avec $a_1 = -3.8\,\mathrm{fm}$ et $a_2 = -1.2\,\mathrm{fm}$.

Récrivons le théorème optique en utilisant (13.56)

$$\mathrm{Im}\, f(\theta = 0) = \frac{k}{4\pi}\int |f(\Omega)|^2\,\mathrm{d}\Omega - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{Im}\, V(\vec{r})|\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2\,\mathrm{d}^3 r \qquad (13.57)$$

Cette équation peut être généralisée. Définissons l'amplitude de diffusion $f(k\hat{r}, \vec{k})$ à partir de la solution (13.9) $\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r})$ de l'équation de Schrödinger

$$\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(k\hat{r}, \vec{k})\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}$$

Comme le potentiel n'est pas supposé invariant par rotation, l'amplitude de diffusion dépend de $\hat{r}$ et de $\vec{k}$, et pas uniquement de $k$ et de l'angle entre $\hat{r}$ et $\hat{k}$. Si l'on désigne par $\vec{k}\,' = k\hat{r}$ le vecteur d'onde après diffusion,

$$\vec{k}\,' = k\hat{r} \qquad\qquad f(k\hat{r}, \vec{k}) = f(\vec{k}\,', \vec{k})$$

on montre alors la *relation d'unitarité* qui généralise (13.57)

$$\frac{1}{2\mathrm{i}}\left[f(\vec{k}\,', \vec{k}) - f^*(\vec{k}, \vec{k}\,')\right] = \frac{k}{4\pi}\int f^*(k\hat{r}, \vec{k}\,')f(k\hat{r}, \vec{k})\,\mathrm{d}\Omega_{\vec{r}}$$
$$- \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{Im}\, V(\vec{r})\,[\psi^{(+)}_{\vec{k}\,'}(\vec{r})]^*\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r})\mathrm{d}^3 r \quad (13.58)$$

La démonstration de cette égalité suit le canevas de celle donnée au § 13.4.2, et les détails sont renvoyés à l'exercice 13.6.8. L'invariance par renversement du sens du temps (§ 13.5.5) implique $f(\vec{k}\,', \vec{k}) = f(-\vec{k}, -\vec{k}\,')$ et celle par parité $f(\vec{k}\,', \vec{k}) = f(-\vec{k}\,', -\vec{k})$. Si ces deux invariances sont valides, $f(\vec{k}\,', \vec{k}) = f(\vec{k}, \vec{k}\,')$ et

$$\frac{1}{2\mathrm{i}}\left[f(\vec{k}\,', \vec{k}) - f^*(\vec{k}, \vec{k}\,')\right] = \mathrm{Im}\, f(\vec{k}\,', \vec{k})$$

dans (13.58). On retrouve alors (13.57) en prenant $\vec{k}\,' = \vec{k}$.

## 13.4 Développements formels

### 13.4.1 Équation intégrale de la diffusion

Nous allons reprendre dans cette section quelques points que nous avons laissés dans l'ombre jusqu'à présent, afin de clarifier certains des arguments précédents. Nous allons d'abord démontrer une équation, l'équation intégrale de la diffusion, qui nous permettra de justifier les expressions asymptotiques (13.9) et (13.10) et se révèlera également utile dans d'autres développements de la théorie de la diffusion. La démonstration repose sur l'expression des *fonctions de Green* $G_0(\vec{r})$ de l'équation de Schrödinger lorsque $V = 0$, qui vérifient

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}\,\delta(\vec{r}) \tag{13.59}$$

Le facteur $2m/\hbar^2$ assure la cohérence des notations avec celles des sections suivantes. De façon générale, les fonctions de Green $G$ d'une équation d'onde $\mathcal{L}\psi = 0$ sont définies par $\mathcal{L}G = \delta(\vec{r})$ (section 12.1). La solution de ce type d'équation n'est pas unique et la forme précise de la fonction de Green que l'on doit utiliser pour un problème donné est fixée par des conditions aux limites. Nous aurons besoin des fonctions de Green $G_0^{(\pm)}(\vec{r})$ ayant pour $r \to \infty$ un comportement d'onde sphérique sortante dans le cas de $G_0^{(+)}(\vec{r})$ et entrante dans le cas de $G_0^{(-)}(\vec{r})$. Ces fonctions de Green sont données par [12]

$$G_0^{(\pm)}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi}\,\frac{2m}{\hbar^2}\,\frac{\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kr}}{r} \tag{13.60}$$

La vérification de (13.59) est immédiate

$$\begin{aligned}
\nabla^2 \frac{\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kr}}{r} &= \nabla^2\left[\frac{\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kr} - 1}{r}\right] + \nabla^2 \frac{1}{r} \\
&= \frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kr} - 4\pi\delta(\vec{r}) \\
&= -k^2\,\frac{\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kr}}{r} - 4\pi\delta(\vec{r})
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que la fonction $(\exp(\mathrm{i}kr) - 1)/r$ est régulière à $r = 0$ et (13.42).

Examinons le comportement de la fonction $G_0^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}\,')$ lorsque $r \to \infty$ tandis que $r'$ reste fini. Dans cette limite,

$$|\vec{r} - \vec{r}\,'| = r - \hat{r}\cdot\vec{r}\,' + O\left(\frac{r'^2}{r}\right)$$

12. Toute combinaison $\lambda G^{(+)} + (1-\lambda)G^{(-)} + G_h$, où $G_h$ est solution de l'équation d'ondes homogène, vérifie également (13.59).

et nous obtenons, en définissant $\vec{k}\,' = k\hat{r}$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\,G_0^{(+)}(\vec{r}-\vec{r}\,') = -\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}k|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{4\pi r} = -\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}}{4\pi r} + O\left(k\frac{r'^2}{r^2}\right) \tag{13.61}$$

ce qui montre que $G_0^{(+)}$ a bien un comportement d'onde sphérique sortante. La fonction $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ définie de façon implicite par

$$\boxed{\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int G_0^{(+)}(\vec{r}-\vec{r}\,')V(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}\,')\,\mathrm{d}^3r'} \tag{13.62}$$

obéit à l'équation de Schrödinger. En effet, en utilisant (13.59)

$$(\nabla^2+k^2)\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}\int \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')V(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}\,') = \frac{2m}{\hbar^2}\,V(\vec{r})\,\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$$

L'équation (13.62) est appelée *équation intégrale de la diffusion*. Le point essentiel est que $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ a bien le comportement asymptotique (13.9). En effet, en utilisant (13.61) et (13.62) lorsque $r\to\infty$

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \simeq \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}V(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}\,')\mathrm{d}^3r' \tag{13.63}$$

En choisissant $G_0^{(-)}$ au lieu de $G_0^{(+)}$, on obtiendrait bien évidemment le comportement asymptotique (13.10) de $\psi_{\vec{k}}^{(-)}(\vec{r})$ avec une onde sphérique sortante. On identifie immédiatement l'amplitude de diffusion $f(\Omega)$ à partir de (13.9)

$$\boxed{f(\Omega) = f(\vec{k}\,',\vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}V(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}\,')\mathrm{d}^3r'} \tag{13.64}$$

Cette équation est *exacte*, mais bien sûr il faut connaître $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$, et on ne peut pas se dispenser de la résolution de l'équation de Schrödinger ! On peut résoudre (13.63) de façon approchée par itération, la première itération étant

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

En reportant dans (13.64), on obtient $f(\vec{k}\,',\vec{k})$ à *l'approximation de Born*

$$\boxed{f_{\mathrm{B}}(\vec{k}\,',\vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}V(\vec{r})\mathrm{d}^3r} \tag{13.65}$$

Le vecteur $\vec{q} = \vec{k}\,' - \vec{k}$ est le transfert de vecteur d'onde, $\hbar\vec{q}$ le *transfert d'impulsion* et $f_{\mathrm{B}}$ est la transformée de Fourier du potentiel par rapport à $\vec{q}$. On note que

$$q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$$

et que $f_{\rm B}$ ne dépend que de la combinaison $k\sin(\theta/2)$ de $k$ et de $\theta$ si le potentiel est à symétrie sphérique. Cette particularité est bien sûr spécifique de l'approximation de Born. Les critères de validité de l'approximation de Born sont délicats à énoncer de façon précise : en gros, il faut que l'énergie soit grande ou que le potentiel soit faible. Dans le cas de la diffusion coulombienne, l'approximation de Born donne le résultat exact pour la *section efficace* (mais non pour l'amplitude !) à toute énergie, très en dehors de son domaine théorique de validité (exercice 13.6.4).

## 13.4.2 Matrice $T$

Revenons à l'équation exacte (13.64) pour l'amplitude de diffusion, et écrivons-la avec les notations de Dirac ; nous utiliserons indifféremment $|\varphi_{\vec k}\rangle$ ou $|\vec k\rangle$ pour une onde plane de vecteur d'onde $\vec k$ avec la normalisation $\langle \vec r|\vec k\rangle = \exp({\rm i}\vec k\cdot\vec r)$. L'équation (13.64) peut s'écrire

$$\boxed{f(\vec k\,',\vec k) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle\varphi_{\vec k\,'}|V|\psi^{(+)}_{\vec k}\rangle} \tag{13.66}$$

Nous allons maintenant démontrer plusieurs relations importantes en examinant le comportement asymptotique $r\to\infty$ des solutions de l'équation de Schrödinger. Établissons un premier résultat préliminaire sur le comportement asymptotique des ondes planes

$$e^{\,{\rm i}\vec k\cdot\vec r} \underset{r\to\infty}{\simeq} \frac{2\pi}{{\rm i}kr}\left(\delta(\Omega_{\vec r}-\Omega_{\vec k})e^{\,{\rm i}kr}-\delta(\Omega_{\vec r}+\Omega_{\vec k})e^{-{\rm i}kr}\right)+O\left(\frac{1}{r^2}\right) \tag{13.67}$$

où $\Omega_{\vec r}$ par exemple désigne l'angle solide $\Omega_{\vec r}=(\theta,\phi)$ donnant la direction de $\vec r$. Pour démontrer ce résultat, considérons une fonction $\Phi(\Omega)$ de l'angle azimutal $\phi$ et du cosinus de l'angle polaire $\theta$, $\mu=\cos\theta$, qui soit suffisamment dérivable, et effectuons une intégration par parties dans

$$\begin{aligned} J &= \int e^{\,{\rm i}\vec k\cdot\vec r}\,\Phi(\Omega){\rm d}\Omega = \int e^{\,{\rm i}kr\mu}\,\Phi(\mu,\phi){\rm d}\mu\,{\rm d}\phi \\ &= \int {\rm d}\phi\left[\frac{e^{\,{\rm i}kr\mu}\,\Phi(\mu,\phi)}{{\rm i}kr}\right]_{-1}^{+1} - \frac{1}{{\rm i}kr}\int_{-1}^{+1} e^{\,{\rm i}kr\mu}\,\frac{\partial\Phi}{\partial\mu}{\rm d}\mu\,{\rm d}\phi \end{aligned}$$

La fonction $\Phi(\mu,\phi)$ est indépendante de $\phi$ pour $\mu=\pm1$, et d'autre part, le second terme de l'équation précédente donne une contribution en $1/(kr)^2$, car l'intégration sur $\mu$ donne un facteur supplémentaire $1/(kr)$. Finalement, l'intégrale $J$ vaut

$$J = \frac{2\pi}{{\rm i}kr}\left(\Phi(\Omega_{\vec k})e^{\,{\rm i}kr}-\Phi(-\Omega_{\vec k})e^{-{\rm i}kr}\right]+O\left(\frac{1}{r^2}\right)$$

ce qui justifie (13.67). Le deuxième résultat préliminaire découle du théorème de Green. Soit deux solutions $\psi$ et $\hat\psi$ de l'équation de Schrödinger de même

énergie $E$ mais correspondant à des potentiels $V$ et $\hat{V}$ différents

$$\begin{aligned}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi &= E\psi \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}\right)\hat{\psi} &= E\hat{\psi}\end{aligned} \tag{13.68}$$

Multiplions la première des équations (13.68) par $\hat{\psi}^*$, prenons le complexe conjugué de la seconde, multiplions la par $\psi$ et soustrayons de la première

$$\hat{\psi}^*\nabla^2\psi - \psi(\nabla^2\hat{\psi}^*) = \frac{2m}{\hbar^2}\hat{\psi}^*(V - \hat{V})\psi \tag{13.69}$$

Intégrons ce résultat à l'intérieur d'une sphère $\mathcal{S}(R)$ de rayon $R \to \infty$ et utilisons le théorème de Green pour transformer l'intégrale de volume du premier membre en intégrale sur la surface de la sphère $\mathcal{S}(R)$

$$\begin{aligned}\int_{r\le R} \mathrm{d}^3 r\, \left(\hat{\psi}^*\nabla^2\psi - \psi(\nabla^2\hat{\psi}^*)\right) &= \int_{\mathcal{S}(R)} \left(\hat{\psi}^*\vec{\nabla}\psi - \psi(\vec{\nabla}\hat{\psi}^*)\right)\cdot \mathrm{d}\vec{\mathcal{S}} \\ &= \int_{\mathcal{S}(R)} \left(\hat{\psi}^*\frac{\partial\psi}{\partial r} - \psi\frac{\partial\hat{\psi}^*}{\partial r}\right)\Big|_{r=R} R^2\mathrm{d}\Omega_{\vec{r}} \\ &= W_R(\hat{\psi}^*, \psi)\end{aligned} \tag{13.70}$$

On pourrait penser que le membre de gauche de (13.70) s'annule car $\nabla^2$ est *a priori* un opérateur hermitien. Mais $\nabla^2$ n'est en fait pas hermitien (ou plus exactement pas auto-adjoint) pour des fonctions $\psi$ et $\hat{\psi}$ de type onde plane + onde sphérique qui ne décroissent pas suffisamment vite à l'infini : voir l'exercice 13.6.7. Pour prendre en compte l'intégration sur $\vec{r}$ dans le second membre de (13.69), nous utilisons la notation de Dirac avec $R \to \infty$

$$\lim_{R\to\infty}\left[\frac{2m}{\hbar^2}\int_{r\le R}\mathrm{d}^3 r\, \hat{\psi}^*(V - \hat{V})\psi\right] = \frac{2m}{\hbar^2}\langle\hat{\psi}|(V - \hat{V})|\psi\rangle \tag{13.71}$$

Comme les potentiels sont supposés décroître suffisamment rapidement à l'infini, il est possible de prendre la limite $R \to \infty$ dans le premier membre de (13.71).

Nous allons choisir pour $\psi$ une solution $\psi^{(+)}$ de type onde plane + onde sortante et pour $\hat{\psi}$ une solution $\hat{\psi}^{(-)}$ de type onde plane + onde entrante.

$$\begin{aligned}\psi^{(+)}_{\vec{k}} &\underset{r\to\infty}{\simeq} \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + f^{(+)}(\Omega_{\vec{r}})\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r} \\ \hat{\psi}^{(-)}_{\vec{k}\,'} &\underset{r\to\infty}{\simeq} \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\,'\cdot\vec{r}} + \hat{f}^{(-)}(\Omega_{\vec{r}})\,\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'r}}{r}\end{aligned} \tag{13.72}$$

avec $k = k'$ car la diffusion est élastique. Pour évaluer $W(\hat{\psi}^*, \psi) = \lim_{R\to\infty} W_R(\hat{\psi}^*, \psi)$, où $W_R$ est défini en (13.70), nous devons calculer 4 termes

$$W(\hat{\psi}^*, \psi) = W\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\,'\cdot\vec{r}}, \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) + W\left([\hat{f}^{(-)}]^*(\Omega_{\vec{r}})\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}k'r}}{r}, \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\right)$$
$$+W\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\,'\cdot\vec{r}}, f^{(+)}[\Omega_{\vec{r}}]\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}\right) + W\left((\hat{f}^{(-)})^*(\Omega_{\vec{r}})\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}k'r}}{r}, f^{(+)}(\Omega_{\vec{r}})\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}\right)$$

En revenant au membre de gauche de (13.70), on voit que le premier terme s'annule car, par exemple, $\nabla^2\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = -\vec{k}^2\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$ et $\vec{k}^2 = \vec{k}\,'^2$ pour une diffusion élastique. En utilisant (13.67), on montre que le deuxième terme vaut $4\pi[\hat{f}^{(-)}]^*(-\Omega_{\vec{k}})$, le troisième vaut $-4\pi f^{(+)}(\Omega_{\vec{k}\,'})$ et le quatrième terme s'annule. Il reste donc

$$\langle\hat{\psi}^{(-)}_{\vec{k}\,'}|(V-\hat{V})|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m}\left[f^{(+)}(\Omega_{\vec{k}\,'}) - [\hat{f}^{(-)}]^*(-\Omega_{\vec{k}})\right] \tag{13.73}$$

Pour faire le lien avec les notations précédentes, on observe que

$$f^{(+)}(\Omega_{\vec{k}\,'}) = f^{(+)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = f(\vec{k}\,', \vec{k}) \qquad\qquad f^{(-)}(-\Omega_{\vec{k}}) \equiv f^{(-)}(-\vec{k}, \vec{k}\,')$$

Comme première application de (13.73), choisissons $\hat{V} = 0$, et donc $\psi^{(-)}_{\vec{k}\,'} = \varphi_{\vec{k}\,'}$, ce qui redonne (13.64)

$$\langle\varphi_{\vec{k}\,'}|V|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m}f^{(+)}(\Omega_{\vec{k}\,'}) \tag{13.74}$$

Choisissons ensuite $V = \hat{V}$, avec pour résultat

$$f^{(+)}(\Omega_{\vec{k}\,'}) = [f^{(-)}]^*(-\Omega_{\vec{k}}) \tag{13.75}$$

Choisissons finalement $V = 0$, $\hat{V} = V$, nous obtenons

$$\langle\psi^{(-)}_{\vec{k}\,'}|V|\varphi_{\vec{k}}\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m}\,[f^{(-)}]^*(-\Omega_{\vec{k}}) \tag{13.76}$$

Des équations (13.74) à (13.76), nous déduisons l'importante égalité

$$\langle\psi^{(-)}_{\vec{k}\,'}|V|\varphi_{\vec{k}}\rangle = \langle\varphi_{\vec{k}\,'}|V|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle \tag{13.77}$$

L'expression de la section efficace différentielle s'obtient à partir de (13.12)

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(\vec{k}\to\vec{k}\,')}{\mathrm{d}\Omega_{\vec{k}\,'}} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}|\langle\varphi_{\vec{k}\,'}|V|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle|^2 \tag{13.78}$$

Il est instructif d'écrire la section efficace différentielle en faisant intervenir la densité d'états finaux $\mathcal{D}(E)$ pour $\mathcal{V} = 1$ (8.136) sous la forme

$$\mathcal{D}(E) = \frac{m\hbar k}{(2\pi\hbar)^3} \tag{13.79}$$

ce qui permet d'écrire (13.78) en fonction de la vitesse $v = \hbar k/m$ et de $\mathcal{D}(E)$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(\vec{k} \to \vec{k}\,')}{\mathrm{d}\Omega_{\vec{k}\,'}} = \frac{2\pi}{\hbar v} |\langle \varphi_{\vec{k}\,'}|V|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle|^2 \mathcal{D}(E) \tag{13.80}$$

À l'approximation de Born, ce résultat coïncide avec celui que l'on obtiendrait à partir de la règle d'or de Fermi (8.152). La combinaison $\langle \varphi_{\vec{k}\,'}|V|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle$ n'est pas un élément de matrice de $V$ car $\varphi_{\vec{k}\,'}$ et $\psi^{(+)}_{\vec{k}}$ sont des vecteurs appartenant à des bases différentes de l'espace de Hilbert. Il est donc utile de définir un opérateur $T$, appelé *matrice* $T$, dont les éléments de matrice sont pris entre vecteurs d'une *même base* $|\varphi_{\vec{k}}\rangle$

$$T(\vec{k}\,', \vec{k}) \equiv T(\vec{k} \to \vec{k}\,') = \langle \varphi_{\vec{k}\,'}|T|\varphi_{\vec{k}}\rangle = \langle \varphi_{\vec{k}\,'}|V|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m}\, f(\vec{k}\,', \vec{k}) \tag{13.81}$$

Notons que la matrice $T$ n'est pour le moment définie qu'entre états de même énergie, car $k = k'$. La relation d'unitarité (13.58) lorsque $\mathrm{Im}\, V = 0$ s'écrit aussi en fonction de la matrice $T$

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\mathrm{i}}\left[T(\vec{k}\,', \vec{k}) - T^*(\vec{k}, \vec{k}\,')\right] &= -\frac{m\hbar k\pi}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{d}\Omega_{\vec{k}''}\, T^*(\vec{k}'', \vec{k}\,')T(\vec{k}'', \vec{k})\\ &= -\pi\int \mathcal{D}(E)\mathrm{d}\Omega_{\vec{k}''}\, T^*(\vec{k}'', \vec{k}\,')T(\vec{k}'', \vec{k})\end{aligned} \tag{13.82}$$

Cette relation d'unitarité fait intervenir la densité d'états (8.136) pour un volume $\mathcal{V} = 1$

$$\mathcal{D}(E)\mathrm{d}\Omega_{\vec{k}''} = \frac{m\hbar k}{(2\pi\hbar)^3}\mathrm{d}\Omega_{\vec{k}''}$$

### 13.4.3 Diffusion d'un paquet d'ondes

Un deuxième point qu'il est nécessaire de justifier est l'utilisation d'un formalisme stationnaire, alors que la diffusion d'une particule est fondamentalement un processus dépendant du temps ; il nous faut donc étudier la diffusion d'un paquet d'ondes. Nous supposerons le paquet d'ondes centré autour d'une impulsion $\hbar\vec{k}_0$ avec une dispersion $\Delta k \ll k_0$, et nous supposerons aussi que la dimension $\Delta r \sim 1/\Delta k$ du paquet d'ondes est très petite par rapport aux distances caractéristiques de l'expérience, par exemple la distance cible-détecteur. Le paquet d'ondes libre s'écrit sous une forme qui généralise (8.44) à trois dimensions

$$\varphi(\vec{r}, t) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\, A(\vec{k}) \exp\left[\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r} - \mathrm{i}\omega_k t\right] \tag{13.83}$$

avec $\omega_k = \hbar k^2/(2m)$, la fréquence moyenne étant $\omega_0 = \hbar k_0^2/(2m)$. Nous avons montré au § 8.1.5 que si la condition $(\Delta k)^2\hbar t/m \ll 1$ était vérifiée (ce qui est

pratiquement toujours le cas), on pouvait alors négliger l'étalement du paquet d'ondes et (13.83) sous la forme (8.51) généralisée à trois dimensions (avec les changements de notations $\overline{k} \to k_0,\ v_g \to v_0$) devient

$$\varphi(\vec{r},t) \simeq \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega_0 t}\varphi(\vec{r}-\vec{v}_0 t, t=0) \tag{13.84}$$

où la vitesse de groupe $\vec{v}_0 = \hbar\vec{k}_0/m$. Ceci implique que $|\varphi(\vec{r},t)|$ est négligeable si $|\vec{r}-\vec{v}_0 t| \gg \Delta r$, c'est-à-dire si $|\vec{r}-\vec{v}_0 t|$ est grand par rapport à l'extension $\Delta r$ du paquet d'ondes. La fonction d'onde dépendant du temps $\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r},t)$ en présence du potentiel $V(\vec{r})$ s'obtient en remplaçant dans l'expression (13.83) du paquet d'ondes l'onde plane $\exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r})$ par $\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r})$. L'expression ainsi obtenue est en effet solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps en présence du potentiel $V(\vec{r})$, avec un comportement d'onde sphérique sortante. Décomposons la fonction d'onde $\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r},t)$ en une partie libre et une partie diffusée

$$\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r},t) + \psi_{\mathrm{diff}}(\vec{r},t)$$

Lorsque le paquet d'ondes est loin de la cible, on peut remplacer $\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r})$ par sa forme asymptotique (13.63)

$$\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}) \to \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(k\hat{r},\vec{k})\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}$$

et donc

$$\psi_{\mathrm{diff}}(\vec{r},t) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\, A(\vec{k}) f(k\hat{r},\vec{k})\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_k t}$$

Supposons que $f(k\hat{r},\vec{k})$ varie suffisamment lentement[13] avec $\vec{k}$ . Dans ces conditions,

$$f(k\hat{r},\vec{k}) \simeq f(k_0\hat{r},\vec{k}_0)$$

et la partie diffusée est

$$\psi_{\mathrm{diff}}(\vec{r},t) \simeq \frac{f(k_0\hat{r},\vec{k}_0)}{r}\int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\, A(\vec{k}) \exp[\mathrm{i}(kr-\omega_k t)] \tag{13.85}$$

On remarque ensuite que

$$k = [(\vec{k}_0+(\vec{k}-\vec{k}_0))^2]^{1/2} = k_0+\hat{k}_0\cdot(\vec{k}-\vec{k}_0)+O\left(\frac{(\Delta k)^2}{k_0}\right) = \hat{k}_0\cdot\vec{k}+O\left(\frac{(\Delta k)^2}{k_0}\right)$$

Comme le temps caractéristique $t \sim r/v_0 = mr/(\hbar k_0)$

$$\frac{(\Delta k)^2\, r}{k_0} \simeq \frac{(\Delta k)^2\hbar t}{m} \ll 1$$

13. En présence d'une résonance, il peut arriver que cette condition ne soit pas vérifiée.

et on peut remplacer $kr$ dans (13.85) par $r\hat{k}_0 \cdot \vec{k}$ ce qui donne

$$\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t) \simeq \frac{f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)}{r}\, \varphi(r\hat{k}_0, t) \simeq \frac{f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)}{r}\, \varphi[(r - v_0 t)\hat{k}_0, 0]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}$$

Lorsque $t$ est grand et négatif, $|(r - v_0 t)| \gg \Delta r$ et comme $\varphi(r', 0)$ est négligeable pour $r' \gg \Delta r$, $\psi_{\text{diff}} \to 0$ et le paquet d'ondes tend vers un paquet d'ondes libre : tant que le paquet d'ondes n'a pas de recouvrement avec le potentiel, $\psi_{\text{diff}}$ est pratiquement nul

$$\lim_{t \to -\infty} \psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}, t)$$

Le paquet d'ondes interagit avec la cible pour $t \sim 0$ et lorsque $t \to +\infty$

$$\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t) \simeq \frac{f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)}{r}\, \varphi[(r - v_0 t)\hat{k}_0, 0]\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}$$

On retrouve le paquet d'ondes dans une direction différente de la direction initiale, modulé par l'amplitude de diffusion $f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)$ et se propageant radialement avec une vitesse $v_0$.

Nous pouvons maintenant calculer la probabilité $\mathrm{d}\mathsf{p}$ de déclenchement d'un détecteur de surface $\mathrm{d}\mathcal{S} = r^2\mathrm{d}\Omega$ placé dans la direction $\vec{r}$. Comme le courant à l'instant $t$ est $v_0|\psi_{\text{diff}}|^2\hat{r}$, la probabilité de déclencher le détecteur est

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\mathsf{p} &= v_0 r^2 \mathrm{d}\Omega \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t)|^2 \mathrm{d}t \\ &= v_0\, \mathrm{d}\Omega |f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi[(r - v_0 t)\hat{k}_0, 0]|^2 \mathrm{d}t\end{aligned}$$

Par ailleurs, la probabilité pour que la particule incidente traverse une surface unité perpendiculaire au faisceau incident est

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi[(r - v_0 t)\hat{k}_0, 0]|^2 \mathrm{d}t$$

et on déduit de la définition (13.1) de la section efficace

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)|^2 = |f(\Omega)|^2 \tag{13.86}$$

ce qui complète la justification de (13.12).

## 13.5 Théorie opératorielle de la diffusion

### 13.5.1 Équations de Lippman-Schwinger

Nous avons jusqu'à présent utilisé le formalisme de la mécanique ondulatoire pour l'étude de la diffusion, par exemple pour écrire l'équation intégrale

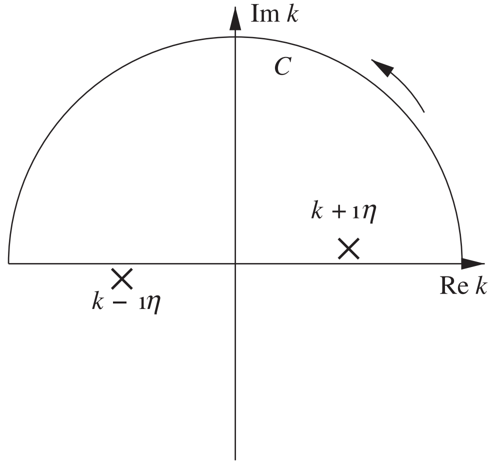



FIG. 13.6 – Contour d'intégration dans le plan complexe en $k$ pour le calcul de $G_0^{(+)}(\vec{r}; E)$.

de la diffusion (13.62) ou pour prouver les équations (13.74) à (13.76). Il est souvent commode d'éviter les fonctions d'onde et de déduire les résultats importants à partir de manipulations d'opérateurs : nous verrons par exemple que les équations (13.74) à (13.76) ou la relation d'unitarité (13.58) peuvent être démontrées de façon plus simple en manipulant des opérateurs adéquats, sans passer par l'intermédiaire du comportement asymptotique des fonctions d'onde. Cependant, cette simplicité a un coût : la signification physique des ces manipulations n'est pas évidente, et de plus les opérateurs utilisés sont singuliers et leur utilisation demande certaines précautions : exercice 13.6.7. Un autre avantage du formalisme opératoriel est qu'il se généralise facilement au cas des collisions inélastiques : c'est ce que nous verrons au § 13.5.3, mais, dans un premier temps, nous nous limitons au cas *élastique*, afin de faire le lien avec les sections précédentes. Pour introduire l'équation de Lippman-Schwinger, donnons une seconde façon de déduire la fonction de Green (13.60), un peu plus longue mais indispensable pour la suite. Suivant le § 12.1.2, la fonction de Green $G_0^{(+)}(\vec{r}; E)$, avec $E = \hbar^2 k^2/2m$, s'obtient comme une transformée de Fourier ($\eta \to 0^+$)

$$
\begin{aligned}
G_0^{(+)}(\vec{r}; E) &= \int \frac{\mathrm{d}^3 k'}{(2\pi)^3} \frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{r}}}{E - \hbar^2 k'^2/2m + \mathrm{i}\eta} \\
&= -\frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{\mathrm{d}^3 k'}{(2\pi)^3} \frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{r}}}{k'^2 - k^2 - \mathrm{i}\eta}
\end{aligned}
\qquad (13.87)
$$

On intègre sur les angles $(\theta, \phi)$ de $\vec{k}'$, ce qui donne

$$\begin{aligned} G_0^{(+)}(\vec{r}; E) &= -\frac{1}{2\pi^2 r}\,\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^{\infty}\frac{k'\sin k'r\,\mathrm{d}k'}{k'^2 - k^2 - \mathrm{i}\eta} \\ &= -\frac{1}{4\pi^2 \mathrm{i}r}\,\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k'\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}k'r}\,\mathrm{d}k'}{k'^2 - k^2 - \mathrm{i}\eta} \end{aligned}$$

Les pôles du dénominateur sont situés à

$$k' = \pm\sqrt{k^2 + \mathrm{i}\eta} = \pm(k + \mathrm{i}\eta)$$

ce qui permet d'intégrer de $-\infty$ à $+\infty$ en évitant les pôles (figure 13.6). Étant donné que la fonction $k'/(k'^2 - k^2)$ décroît comme $1/k'$ à l'infini, on peut refermer le contour d'intégration dans le demi-plan complexe supérieur, et seul le pôle à $k' = k + \mathrm{i}\eta$ contribue au résultat final, bien entendu identique à (13.60)

$$G_0^{(+)}(\vec{r}; E) = -\frac{1}{4\pi}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r} \qquad E = E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{13.88}$$

La fonction $G^{(-)}(\vec{r}; E)$ complexe conjuguée de $G_0^{(+)}(\vec{r}; E)$ s'obtient par la prescription $k^2 \to k^2 - \mathrm{i}\eta$.

Dans le cas de la diffusion élastique, le hamiltonien total du sytème à deux corps est $H = H_0 + V$, $H_0 = -\hbar^2\nabla^2/2m$ est la partie cinétique du hamiltonien et $V$ le potentiel ; $m$ sera toujours la masse réduite des deux particules entrant en collision : $m = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$ et $\hbar k$ l'impulsion de la particule relative. L'énergie cinétique dans le référentiel du centre de masse est $\hbar^2 k^2/2m$. Nous utiliserons systématiquement la notation $\varphi_{\vec{k}}$ pour une onde plane de vecteur d'onde $\vec{k}$ et $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ $(\psi_{\vec{k}}^{(-)})$ pour une solution d'énergie $E$ de l'équation de Schrödinger

$$H\psi_{\vec{k}}^{(\pm)} = (H_0 + V)\psi_{\vec{k}}^{(\pm)} = E\psi_{\vec{k}}^{(\pm)} \tag{13.89}$$

dont le comportement à l'infini est celui d'une onde plane plus une onde sphérique sortante (entrante). Nous allons éviter autant que possible les notations de Dirac $|\varphi_{\vec{k}}\rangle$ et $|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle$ afin d'alléger l'écriture. La normalisation est fixée par

$$\langle\vec{r}\,|\varphi_{\vec{k}}\rangle = \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \;\text{ et donc }\; \int\frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}|\varphi_{\vec{k}}\rangle\langle\varphi_{\vec{k}}| = I \tag{13.90}$$

Montrons que l'équation intégrale de la diffusion (13.62) est équivalente à *l'équation de Lippman-Schwinger*, avec $E_k = \hbar^2 k^2/2m$

$$\boxed{\psi_{\vec{k}}^{(+)} = \varphi_{\vec{k}} + \frac{1}{E_k - H_0 + \mathrm{i}\eta}V\psi_{\vec{k}}^{(+)}} \tag{13.91}$$

Pour montrer cette équivalence, multiplions (13.91) à gauche par le bra $\langle\vec{r}\,|$ et utilisons la relation de fermeture (13.90)

$$\begin{aligned}\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) &= \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int \frac{\mathrm{d}^3\,k'}{(2\pi)^3}\,\langle\vec{r}\,|\vec{k}'\rangle\langle\vec{k}'|\frac{1}{E_k - H_0 + \mathrm{i}\eta}V\psi_{\vec{k}}^{(+)} \\ &= \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int \frac{\mathrm{d}^3\,k'\,\mathrm{d}^3 r'}{(2\pi)^3}\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}'\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\frac{1}{E_k - E_{k'} + \mathrm{i}\eta}V(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}\,') \\ &= \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int \mathrm{d}^3 r'\,G_0^{(+)}(\vec{r}-\vec{r}\,';E_k)V(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}\,') \end{aligned} \tag{13.92}$$

ce qui est bien l'équation intégrale de la diffusion (13.62). L'équation complémentaire de (13.91) est celle donnant $\psi_{\vec{k}}^{(-)}$ dont le comportement asymptotique est en onde plane + onde entrante

$$\psi_{\vec{k}}^{(-)} = \varphi_{\vec{k}} + \frac{1}{E_k - H_0 - \mathrm{i}\eta}V\psi_{\vec{k}}^{(-)} \tag{13.93}$$

Une expression équivalente de $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ résulte de l'identité

$$\frac{1}{E - H + \mathrm{i}\eta} - \frac{1}{E - H_0 + \mathrm{i}\eta} = \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\eta}V\frac{1}{E - H_0 + \mathrm{i}\eta} \tag{13.94}$$

que l'on vérifie en multipliant les deux membres à droite par $(E - H_0 + \mathrm{i}\eta)$ et à gauche par $(E - H + \mathrm{i}\eta)$. Une autre écriture utile de (13.94) est

$$\frac{1}{E - H_0 + \mathrm{i}\eta} = \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\eta}\left(I - V\,\frac{1}{E - H_0 + \mathrm{i}\eta}\right) \tag{13.95}$$

Cette relation permet de donner une autre version de l'équation de Lippman-Schwinger

$$\boxed{\psi_{\vec{k}}^{(+)} = \varphi_{\vec{k}} + \frac{1}{E_k - H + \mathrm{i}\eta}V\,\varphi_{\vec{k}}} \tag{13.96}$$

Cette version de l'équation de Lippman-Schwinger permet d'écrire $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ en fonction de $\varphi_{\vec{k}}$ en utilisant un développement en puissances de $V$, c'est-à-dire un développement perturbatif. Pour le montrer, le plus simple est d'utiliser dans (13.95) les fonctions de Green $G_0^{(+)}(E)$ et $G^{(+)}(E)$

$$G_0^{(+)}(E) = \frac{1}{E - H_0 + \mathrm{i}\eta} \qquad\qquad G^{(+)}(E) = \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\eta} \tag{13.97}$$

et (13.95) devient

$$G_0^{(+)}(E) = G^{(+)}(E)(I + VG_0^{(+)}(E))$$

ce qui se récrit

$$\begin{aligned} G^{(+)}(E) &= G_0^{(+)}(E)(I - VG_0^{(+)}(E))^{-1} \\ &= G_0^{(+)}(E) + G_0^{(+)}(E)VG_0^{(+)}(E) + G_0^{(+)}(E)VG_0^{(+)}(E)VG_0^{(+)}(E) + \cdots \end{aligned} \tag{13.98}$$

On en déduit le développement perturbatif de $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$, ou développement de Born

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)} = \left[ I + \sum_{n=1}^{\infty} [G_0^{(+)}(E)V]^n \right] \varphi_{\vec{k}} \tag{13.99}$$

La convergence des développements (13.98) ou (13.99) n'est évidemment pas garantie. Si $G_0^{(+)}(E)V$ possède une valeur propre $\lambda_0$ de module $> 1$, le développement de Born ne converge certainement pas car $(1 - \lambda G_0^{(+)}(E)V)^{-1}$ est singulier pour $\lambda = \lambda_0^{-1}$

$$\lambda G_0^{(+)}(E)V\psi = \lambda_0 \psi \Rightarrow (1 - \lambda_0^{-1} G_0^{(+)}(E)V)\psi = 0$$

ce qui implique que $(1 - \lambda G_0^{(+)}(E)V)^{-1}$ est singulier pour $\lambda = \lambda_0^{-1} < 1$, et le rayon de convergence de la série est $< 1$.

Montrons aussi l'orthogonalité des fonctions $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ et $\psi_{\vec{k}\,'}^{(+)}$ pour $\vec{k}\,' \neq \vec{k}$, en utilisant la notation $(\varphi, \psi) = \langle \varphi | \psi \rangle$ pour le produit scalaire

$$\begin{aligned} \left( \psi_{\vec{k}}^{(+)}, \psi_{\vec{k}\,'}^{(+)} \right) &= \left( \left[ I + \frac{1}{E_k - H + \mathrm{i}\eta} V \right] \varphi_{\vec{k}}, \psi_{\vec{k}\,'}^{(+)} \right) \\ &= \left( \varphi_{\vec{k}}, \psi_{\vec{k}\,'}^{(+)} + V \frac{1}{E_k - H - \mathrm{i}\eta} \psi_{\vec{k}\,'}^{(+)} \right) \\ &= \left( \varphi_{\vec{k}}, \psi_{\vec{k}\,'}^{(+)} + V \frac{1}{E_k - E_{k'} - \mathrm{i}\eta} \psi_{\vec{k}\,'}^{(+)} \right) \\ &= \left( \varphi_{\vec{k}}, \psi_{\vec{k}\,'}^{(+)} - \frac{1}{E_{k'} - H_0 + \mathrm{i}\eta} V \psi_{\vec{k}\,'}^{(+)} \right) \\ &= (\varphi_{\vec{k}}, \varphi_{\vec{k}\,'}) = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}\,') \end{aligned} \tag{13.100}$$

### 13.5.2 Matrice $T$ et matrice $S$

Nous avons déjà introduit la matrice $T$ au § 13.4.2, et nous en donnons maintenant une définition équivalente dans le cadre de la théorie opératorielle

$$T(E) = V + V \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\eta} V = V + V \frac{1}{E - H_0 + \mathrm{i}\eta} T(E) \tag{13.101}$$

Vérifions que cette nouvelle définition obéit bien aux propriétés attendues, en particulier

$$\langle \varphi_{\vec{k}\,'} | T(E) | \varphi_{\vec{k}} \rangle = \langle \varphi_{\vec{k}\,'} | V | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle \tag{13.102}$$

En effet, d'après (13.96) l'action de $T(E)$ sur $\varphi_{\vec{k}}$ est

$$T(E)\varphi_{\vec{k}} = V\left(I + \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\eta}V\right)\varphi_{\vec{k}} = V\psi_{\vec{k}}^{(+)} \tag{13.103}$$

dont (13.102) découle immédiatement.

La théorie opératorielle permet de retrouver simplement la condition d'unitarité (13.82). Écrivons la seconde expression de $T(E)$ dans (13.101) et son hermitien conjugé

$$T(E) = V + V\frac{1}{E - H_0 + \mathrm{i}\eta}T(E) \qquad T^\dagger(E) = V + T^\dagger(E)\frac{1}{E - H_0 - \mathrm{i}\eta}V \tag{13.104}$$

d'où l'on déduit

$$T = V\left(T^\dagger - T^\dagger\frac{1}{E - H_0 - \mathrm{i}\eta}V\right)\frac{1}{E - H_0 + \mathrm{i}\eta}T$$
$$T^\dagger = V + T^\dagger\frac{1}{E - H_0 - \mathrm{i}\eta}\left(T - V\frac{1}{E - H_0 + \mathrm{i}\eta}T\right)$$

On soustrait ensuite la seconde équation de la première

$$T - T^\dagger = -T^\dagger\left(\frac{1}{E - H_0 - \mathrm{i}\eta} - \frac{1}{E - H_0 + \mathrm{i}\eta}\right)T = -2\mathrm{i}\pi T^\dagger\delta(E - H_0)T \tag{13.105}$$

Il faut prendre garde au fait que $\delta(E - H_0)$ ne commute pas avec $T$. Cependant, on peut écrire

$$\delta(E - H_0)T = T\delta(E' - H_0) \tag{13.106}$$

En effet, prenons l'élément de matrice de $T$ entre les ondes planes $|\vec{k}\rangle$ et $|\vec{k}\,'\rangle$

$$\langle\vec{k}\,'|\delta(E - H_0)T|\vec{k}\rangle = \delta(E - E')T(\vec{k}\,', \vec{k})$$
$$\langle\vec{k}\,'|T\delta(E' - H_0)|\vec{k}\rangle = \delta(E' - E)T(\vec{k}\,', \vec{k})$$

Pour terminer la preuve de la relation d'unitarité, introduisons dans (13.105) la relation de fermeture sur les vecteurs $|\vec{k}''\rangle$ afin d'écrire $\delta(E - H_0)$ sous la forme

$$\delta(E - H_0) = \int \frac{\mathrm{d}^3k''}{(2\pi)^3}\,|\vec{k}''\rangle\delta(E - E'')\langle\vec{k}''|$$

et prenons les éléments de matrice de (13.105) entre les ondes planes $|\vec{k}\rangle$ et $|\vec{k}\,'\rangle$. On retrouve alors (13.82)

$$\frac{1}{2\mathrm{i}}\left[T(\vec{k}\,', \vec{k}) - T^*(\vec{k}, \vec{k}\,')\right] = -\frac{\pi\hbar k m}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{d}\Omega_{\vec{k}''}T^*(\vec{k}'', \vec{k}\,')T(\vec{k}'', \vec{k}\,') \tag{13.107}$$

Nous avons défini la matrice $T$ pour une valeur déterminée $E$ de l'énergie car $E = \hbar^2k^2/2m = E' = \hbar^2{k'}^2/2m$ pour une diffusion élastique. En fait, il est

parfaitement possible de prendre des éléments de matrice de (13.101) entre ondes planes $|\vec{k}\rangle$ et $|\vec{k}\,'\rangle$ d'énergie différente : $\hbar^2k^2/2m \neq \hbar^2{k'}^2/2m$. On dit alors que la matrice T est hors couche d'énergie.

Il reste à définir un dernier objet, la *matrice* $S$, reliée à la matrice $T$ par

$$S = I - 2\mathrm{i}\pi\delta(E - H_0)T \tag{13.108}$$

La matrice $S$ n'est définie que pour $k = k'$, c'est-à-dire sur couche d'énergie : $S(\vec{k}\,', \vec{k}) = \langle\vec{k}\,'|S|\vec{k}\rangle = 0$ si $k' \neq k$. La propriété essentielle de la matrice $S$ est son unitarité

$$\boxed{S^\dagger S = SS^\dagger = I} \tag{13.109}$$

Montrons cette propriété à partir de la définition (13.108)

$$\begin{aligned}
S^\dagger S &= \left(I + 2\mathrm{i}\pi\delta(E - H_0)T^\dagger\right)\left(I - 2\mathrm{i}\pi\delta(E - H_0)T\right) \\
&= I + 2\mathrm{i}\pi\delta(E - H_0)T^\dagger - 2\mathrm{i}\pi\delta(E - H_0)T + 4\pi^2\delta(E - H_0)T^\dagger\delta(E - H_0)T \\
&= I - 2\mathrm{i}\pi\delta(E - H_0)(T - T^\dagger + 2\mathrm{i}\pi T^\dagger\delta(E - H_0)T) = I
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé (13.105). La démonstration de $SS^\dagger = I$ suit le même canevas. Les éléments de matrice $S$ peuvent également s'exprimer en fonction des états $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ et $\psi_{\vec{k}}^{(-)}$

$$\boxed{S(\vec{k}\,', \vec{k}) = \langle\varphi_{\vec{k}\,'}|S|\varphi_{\vec{k}}\rangle = \langle\psi_{\vec{k}\,'}^{(-)}|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle} \tag{13.110}$$

Démontrons cette relation

$$\begin{aligned}
\left(\psi_{\vec{k}\,'}^{(-)}, \psi_{\vec{k}}^{(+)}\right) &= \left(\varphi_{\vec{k}\,'}, \psi_{\vec{k}}^{(+)}\right) + \left(\frac{1}{E_{k'} - H - \mathrm{i}\eta}V\varphi_{\vec{k}\,'}, \psi_{\vec{k}}^{(+)}\right) \\
&= \left(\varphi_{\vec{k}\,'}, \psi_{\vec{k}}^{(+)}\right) + \left(\varphi_{\vec{k}\,'}, V\psi_{\vec{k}}^{(+)}\right)\frac{1}{E_{k'} - E_k + \mathrm{i}\eta}
\end{aligned}$$

D'autre part,

$$\begin{aligned}
\left(\varphi_{\vec{k}\,'}, \psi_{\vec{k}}^{(+)}\right) &= (\varphi_{\vec{k}\,'}, \varphi_{\vec{k}}) + \left(\varphi_{\vec{k}}, \frac{1}{E_k - H_0 + \mathrm{i}\eta}V\psi_{\vec{k}}^{(+)}\right) \\
&= (2\pi)^3\delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}\,') + \frac{1}{E_k - E_{k'} + \mathrm{i}\eta}\left(\varphi_{\vec{k}\,'}, V\psi_{\vec{k}}^{(+)}\right)
\end{aligned}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned}
\left(\psi_{\vec{k}\,'}^{(-)}, \psi_{\vec{k}}^{(+)}\right) &= (2\pi)^3\delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}\,') + \left(\varphi_{\vec{k}\,'}, V\psi_{\vec{k}}^{(+)}\right) \\
&\quad \times \left(\frac{1}{E_{k'} - E_k + \mathrm{i}\eta} - \frac{1}{E_{k'} - E_k - \mathrm{i}\eta}\right) \\
&= (2\pi)^3\delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}\,') - 2\mathrm{i}\pi\delta(E_{k'} - E_k)\left(\varphi_{\vec{k}\,'}, V\psi_{\vec{k}}^{(+)}\right)
\end{aligned} \tag{13.111}$$

On retrouve la définition (13.102). La forme (13.111) de $S$ donne une démonstration simple de la relation d'unitarité : en effet

$$\langle\varphi_{\vec{k}\,'}|S^\dagger|\varphi_{\vec{k}}\rangle = \langle\varphi_{\vec{k}}|S|\varphi_{\vec{k}\,'}\rangle^* = \langle\psi^{(-)}_{\vec{k}\,'}|\psi^{(+)}_{\vec{k}\,'}\rangle^* = \langle\psi^{(+)}_{\vec{k}\,'}|\psi^{(-)}_{\vec{k}}\rangle$$

ce qui implique

$$\begin{aligned}\langle\varphi_{\vec{k}\,'}|S^\dagger S|\varphi_{\vec{k}}\rangle &= \sum_{\vec{k}''}\langle\varphi_{\vec{k}\,'}|S^\dagger|\varphi_{\vec{k}''}\rangle\langle\varphi_{\vec{k}''}|S|\varphi_{\vec{k}}\rangle \\ &= \sum_{\vec{k}''}\langle\psi^{(+)}_{\vec{k}\,'}|\psi^{(-)}_{\vec{k}''}\rangle\langle\psi^{(-)}_{\vec{k}''}|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle\end{aligned}$$

Mais dans la somme sur $\vec{k}''$, on peut ajouter les états liés $|\psi_B\rangle$ car $\langle\psi^{(+)}_{\vec{k}\,'}|\psi_B\rangle = 0$ et

$$\sum_{\vec{k}''}|\psi^{(-)}_{\vec{k}''}\rangle\langle\psi^{(-)}_{\vec{k}''}| + \sum_B|\psi_B\rangle\langle\psi_B = I$$

de sorte que

$$\langle\varphi_{\vec{k}\,'}|S^\dagger S|\varphi_{\vec{k}}\rangle = \langle\psi^{(+)}_{\vec{k}\,'}|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle = (2\pi)^3\delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}\,')$$

### 13.5.3 Collisions inélastiques

Passons maintenant au cas des collisions inélastiques. Dans une collision élastique, il n'y a aucun changement de quelque sorte que ce soit dans l'état interne des particules incidentes

$$A + X \to A + X \tag{13.112}$$

Il peut arriver que dans l'état final une des deux particules, par exemple $A$ (ou les deux), se trouve dans un état orbital excité, ou un état de spin différent de l'état de spin initial, ce que nous noterons $A^*$

$$A + X \to A^* + X \tag{13.113}$$

Il peut aussi y avoir des réarrangements internes, par exemple dans le cas d'une collision entre deux noyaux, les nucléons de l'état final peuvent être redistribués pour former des noyaux différents des noyaux initiaux

$$A + X \to B + Y \tag{13.114}$$

Enfin, il arrive que l'on trouve plus de deux particules dans l'état final, par exemple

$$A + X \to B + C + Y + Z \tag{13.115}$$

Nous ne traiterons pas ce dernier cas de figure, et, pour fixer les idées, nous allons considérer que les seules réactions possibles sont (13.112) : élastique

et (13.114) : inélastique[14]. Ce cas suffira pour comprendre le raisonnement à suivre dans le cas général : voir aussi l'exercice 13.6.8. Un ensemble $(A, X)$, $(B, Y)$, etc. est appelé ensemble de *voies* possibles pour la réaction. Toutes les voies ne sont pas nécessairement accessibles, car pour qu'une voie soit ouverte, il faut une énergie suffisante. Nous appelons $(A, X)$ la voie $\alpha$ et $(B, Y)$ la voie $\beta$ : $\varphi_\alpha$ et $\varphi_\beta$ désignent les états internes comme l'état de spin, $h_\alpha$ et $h_\beta$ les hamiltoniens $h_{\rm int}$ des degrés de liberté internes

$$h_\alpha \varphi_\alpha = e_\alpha \varphi_\alpha \qquad h_\beta \varphi_\beta = e_\beta \varphi_\beta \tag{13.116}$$

Le hamiltonien dans les voies $\alpha$ et $\beta$ s'écrit

$$\begin{aligned}
\text{Voie } \alpha \quad &: \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m_\alpha}\nabla_\alpha^2 + h_\alpha + V_\alpha = H_\alpha + V_\alpha \\
\text{Voie } \beta \quad &: \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m_\beta}\nabla_\beta^2 + h_\beta + V_\beta = H_\beta + V_\beta
\end{aligned} \tag{13.117}$$

Le potentiel $V_\alpha$ est celui du système $\{A, X\}$ et $V_\beta$ celui du système $\{B, Y\}$. *Les collisions seront toujours décrites dans le référentiel du centre de masse* et les sections efficaces seront toujours données dans ce référentiel. Les variables dynamiques comme l'énergie totale $E$, le vecteur d'onde $\vec{k}$ dans une voie donnée, etc. seront celles du centre de masse ; les masses $m_\alpha$ et $m_\beta$ seront donc les masses réduites

$$m_\alpha = \frac{m_A m_X}{m_A + m_X} \qquad m_\beta = \frac{m_B m_Y}{m_B + m_Y} \tag{13.118}$$

La conservation de l'énergie s'écrit

$$E = e_\alpha + \frac{\hbar^2 \vec{k}_\alpha^2}{2m_\alpha} = e_\beta + \frac{\hbar^2 \vec{k}_\beta^2}{2m_\beta} \tag{13.119}$$

À chaque voie, on peut associer une onde plane $\varphi \exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r})$ et une onde sphérique que l'on choisit sortante pour la voie $\alpha$ et entrante pour la voie $\beta$. L'indice $a$ désigne l'ensemble $(\vec{k}_\alpha, \alpha)$ et l'indice $b$ l'ensemble $(\vec{k}_\beta, \beta)$. Le comportement asymptotique[15] de $\Psi_a^{(+)}$ est en onde plane plus onde sphérique sortante dans la voie $\alpha$ et en onde sphérique sortante dans la voie $\beta$

$$\begin{aligned}
\text{Voie}\,\alpha \quad &: \quad \Psi_a^{(+)} \underset{r\to\infty}{\simeq} \varphi_\alpha \left[ \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}_a\cdot\vec{r}} + f_{\alpha a}^{(+)}(\Omega_\alpha)\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}k_a r}}{r} \right] \\
\text{Voie}\,\beta \quad &: \quad \underset{r\to\infty}{\simeq} \varphi_\beta f_{\beta a}^{(+)}(\Omega_\beta)\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}k_b r}}{r}
\end{aligned} \tag{13.120}$$

14. Voir Messiah [1959], chapitre XIX pour une étude plus complète.

15. Nous utilisons des lettres majuscules afin de distinguer $\varphi_a$ (état interne) de $\Phi_a$ (onde plane).

tandis que celui de $\Psi_b^{(-)}$ est en onde plane plus onde sphérique entrante dans la voie $\beta$ et en onde sphérique entrante dans la voie $\alpha$

$$\begin{aligned}\text{Voie}\,\beta \quad &: \quad \Psi_b^{(-)} \underset{r\to\infty}{\simeq} \varphi_\beta \left[ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}_b\cdot\vec{r}} + f_{\beta b}^{(-)}(\Omega_\beta) \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_b r}}{r} \right] \\ \text{Voie}\,\alpha \quad &: \quad \underset{r\to\infty}{\simeq} \varphi_\alpha f_{\alpha b}^{(-)}(\Omega_\alpha) \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_a r}}{r}\end{aligned} \tag{13.121}$$

La section efficace inélastique $\mathrm{d}\sigma(a \to b)/\mathrm{d}\Omega_b$ d'émission de la particule $B$ dans la direction $\Omega_b = \Omega_\beta$ se déduit de (13.120) : elle fait intervenir le rapport du flux de particules finales $B$ à celui des particules initiales $A$, et donc le rapport des vitesses dans le centre de masse, $v_b/v_a$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(a \to b)}{\mathrm{d}\Omega_b} = \frac{v_b}{v_a} \left| f_{\beta a}^{(+)}(\Omega_b) \right|^2 \tag{13.122}$$

Comme au § 13.4.2, on introduit les éléments de matrice $T$ entre ondes planes

$$T(a \to b) = \langle b|T|a\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m_\beta} f_{\beta a}^{(+)}(\Omega_b) \tag{13.123}$$

d'où une expression alternative de la section efficace qui fait intervenir la densité d'états finaux $\mathcal{D}_b(E)$ (8.136) pour $\mathcal{V} = 1$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(a \to b)}{\mathrm{d}\Omega_b} = \frac{2\pi}{\hbar v_a} \Big| T(a \to b) \Big|^2 \mathcal{D}_b(E) \tag{13.124}$$

Écrivons les équations de Schrödinger pour $\Psi_a^{(+)}$ et $\hat{\Psi}_b^{(-)}$ avec des hamiltoniens respectifs $H$ et $\hat{H}$, pour une même valeur $E$ de l'énergie

$$H\Psi_a^{(+)} = E\Psi_a^{(+)} \qquad \hat{H}\hat{\Psi}_b^{(-)} = E\hat{\Psi}_b^{(-)} \tag{13.125}$$

Compte tenu de

$$\begin{aligned} H &= -\sum_{\nu=\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_\nu} \nabla_\nu^2 + h_{\text{int}} + V \\ \hat{H} &= -\sum_{\nu=\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_\nu} \nabla_\nu^2 + h_{\text{int}} + \hat{V} \end{aligned} \tag{13.126}$$

on déduit

$$\begin{aligned} &\int_{r\le R} \mathrm{d}^3 r \left[ [\hat{\Psi}_b^{(-)}]^* \Big( \sum_{\nu=\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_\nu} \nabla_\nu^2 \Psi_a^{(+)} \Big) - \Big( \sum_{\nu=\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_\nu} \nabla_\nu^2 [\hat{\Psi}_b^{(-)}]^* \Big) \Psi_a^{(+)} \right] \\ &\quad = \langle \hat{\Psi}_b^{(-)} | (H - \hat{H}) | \Psi_a^{(+)} \rangle \end{aligned} \tag{13.127}$$

où nous avons pris la limite $R \to \infty$ dans le second membre de (13.127). En utilisant la même stratégie que dans le § 13.4.2, nous obtenons

$$\sum_{\nu=\alpha,\beta} \frac{\hbar^2}{2m_\nu} W\Big([\hat{\Psi}_b^{(-)}]^*, \Psi_a^{(+)}\Big) = \langle \hat{\Psi}_b^{(-)} | (H - \hat{H}) | \Psi_a^{(+)} \rangle \tag{13.128}$$

avec

$$W(f,g) = \lim_{R\to\infty} \int \left( f \frac{\partial g}{\partial r} - g \frac{\partial f}{\partial r} \right) R^2 \mathrm{d}\Omega_r \tag{13.129}$$

En raison de $\langle \varphi_\beta | \varphi_\alpha \rangle = \delta_{\alpha\beta}$, le calcul de $W([\hat{\Psi}_b^{(-)}]^*, \Psi_a^{(+)})$ dépend uniquement de deux contributions : (1) celle de l'onde plane dans $\hat{\Psi}_b^{(-)}$ associée à l'onde sortante dans $\Psi_a^{(+)}$ et (2) celle de l'onde plane dans $\Psi_a^{(+)}$ associée à l'onde entrante dans $\hat{\Psi}_b^{(-)}$, et (13.128) donne

$$-\frac{2\pi\hbar^2}{m_\beta} f_{\beta a}^{(+)}(\Omega_b) + \frac{2\pi\hbar^2}{m_\alpha} [\hat{f}_{\alpha b}^{(-)}]^*(-\Omega_a) = \langle \hat{\Psi}_b^{(-)} | (H - \hat{H}) | \Psi_a^{(+)} \rangle \tag{13.130}$$

Comme première application de (13.130), choisissons $H = \hat{H}$ avec comme résultat

$$\frac{1}{m_\beta} f_{\beta a}^{(+)}(\Omega_b) = \frac{1}{m_\alpha} [f_{\alpha b}^{(-)}]^*(-\Omega_a) \tag{13.131}$$

On peut définir une matrice $\hat{T}$ correspondant au potentiel $\hat{V}$ par analogie avec (13.123)

$$\langle b | \hat{T} | a \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m_\alpha} [\hat{f}_{\alpha b}^{(-)}]^*(-\Omega_a) \tag{13.132}$$

L'équation (13.130) s'écrit en fonction des éléments de matrice de $T$ et $\hat{T}$

$$\langle b | T | a \rangle - \langle b | \hat{T} | a \rangle = \langle \hat{\Psi}_b^{(-)} | (H - \hat{H}) | \Psi_a^{(+)} \rangle \tag{13.133}$$

Par convention, $\langle b | \hat{T} | a \rangle = 0$ si la voie $\alpha$ est fermée à l'onde $\hat{\Psi}_b^{(-)}$, et inversement $\langle b | T | a \rangle = 0$ si la voie $\beta$ est fermée à l'onde $\Psi_a^{(+)}$. Si l'on choisit $\hat{H} = H_\beta$, $H - H_\beta = V_\beta$, alors $\hat{\Psi}_b^{(-)}$ se réduit à l'onde plane $\Phi_b$, et (13.123) à

$$\langle b | T | a \rangle = \langle \Phi_b | V_\beta | \Psi_a^{(+)} \rangle \tag{13.134}$$

Une seconde formule pour $\langle b | T | a \rangle$ se déduit de (13.130), si l'on choisit $H = H_\alpha$ et $\hat{H} = H$

$$\langle b | T | a \rangle = \langle \Psi_b^{(-)} | V_\alpha | \Phi_a \rangle \tag{13.135}$$

L'approximation de Born consiste à remplacer $\Psi_a^{(+)}$ et $\Psi_b^{(-)}$ par des ondes planes

$$T_{\rm B}(a \to b) = \langle \Phi_b | V_\beta | \Phi_a \rangle = \langle \Phi_b | V_\alpha | \Phi_a \rangle \tag{13.136}$$

Comme application de (13.133), nous allons généraliser aux collisions inélastiques la relation d'unitarité (13.105). De l'équation (13.134) et de

$$\begin{aligned} \Psi_a^{(+)} &= \Big( I + \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\eta} \, V_\alpha \Big) \Phi_a \\ \Psi_b^{(-)} &= \Big( I + \frac{1}{E - H - \mathrm{i}\eta} \, V_\beta \Big) \Phi_b \end{aligned} \tag{13.137}$$

on déduit une expression opératorielle pour les éléments de matrice $T$

$$\begin{aligned} \langle b | T | a \rangle &= \langle \Phi_b | V_\beta | \Phi_a \rangle + \langle \Phi_b | V_\beta \, \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\eta} \, V_\alpha | \Phi_a \rangle \\ \langle b | T^\dagger | a \rangle &= \langle \Phi_b | V_\alpha | \Phi_a \rangle + \langle \Phi_b | V_\beta \, \frac{1}{E - H - \mathrm{i}\eta} \, V_\alpha | \Phi_a \rangle \end{aligned} \tag{13.138}$$

En soustrayant membre à membre ces égalités et en tenant compte de (13.136), on obtient la relation d'unitarité

$$\langle b | (T - T^\dagger) | a \rangle = -2\mathrm{i}\pi \langle \Phi_b | V_\beta \delta(E - H) V_\alpha | \Phi_a \rangle \tag{13.139}$$

Pour transformer cette équation, on introduit un système complet d'états $|\Psi_n^{(+)}\rangle$ et $|\Psi_n^{(-)}\rangle$, en y ajoutant éventuellement des états liés $|\Psi_B\rangle$

$$(2\pi)^{-3} \sum_n |\Psi_n^{(-)}\rangle \langle \Psi_n^{(-)}| = (2\pi)^{-3} \sum_n |\Psi_n^{(+)}\rangle \langle \Psi_n^{(+)}| = I$$

ce qui donne pour le second membre de (13.139)

$$\frac{1}{2\mathrm{i}} \, \langle b | (T - T^\dagger) | a \rangle = -\pi \sum_\nu \mathcal{D}_\nu(E) \int \langle b | T^\dagger | n \rangle \mathrm{d}\Omega_\nu \langle n | T | a \rangle \tag{13.140}$$

où $|n\rangle$ représente une onde plane et nous avons utilisé

$$\langle \Phi_b | V_\beta | \Psi_n^{(+)} \rangle = \langle b | T | n \rangle$$

### 13.5.4 Symétries de la matrice $T$

La propriété de symétrie la plus importante de la matrice $T$ est celle liée au renversement du sens du temps (annexe A2). Soit $\Theta$ l'opérateur antiunitaire correspondant et

$$\Phi_{\Theta a} = \Theta \Phi_a \qquad \Phi_{\Theta b} = \Theta \Phi_b \tag{13.141}$$

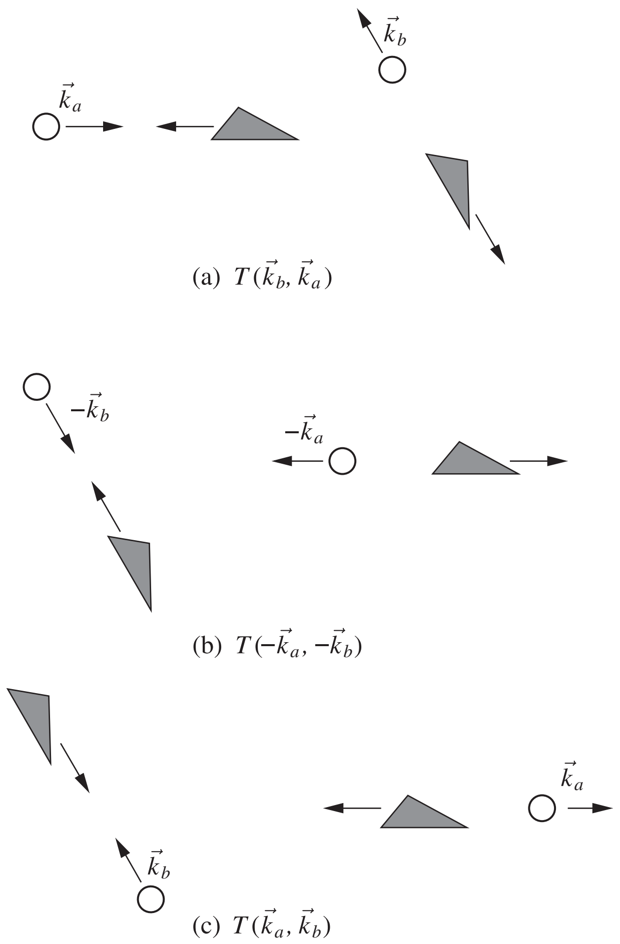



FIG. 13.7 – Les collisions sont décrites dans le référentiel du centre de masse. Les vecteurs d'onde de la particule représentée par un cercle sont $\pm\vec{k}_a$ et $\pm\vec{k}_b$. (a) Réaction directe : $\vec{k}_a \to \vec{k}_b$. (b) Renversement du temps : $-\vec{k}_b \to -\vec{k}_a$. (c) Réaction inverse : $\vec{k}_b \to \vec{k}_a$.

les états qui se déduisent par renversement du temps de $\Phi_a$ et $\Phi_b$. Pour des particules sans spin, le renversement du sens du temps consiste à inverser les impulsions et à échanger les états initiaux et finaux. Pour des particules de spin non nul, il faut en outre inverser la projection du spin sur un axe fixe. Calculons l'élément de matrice $T(\Phi_{\Theta b} \to \Phi_{\Theta a})$ en supposant le hamiltonien et les potentiels invariants par renversement du sens du temps

$$\Theta^{-1}V\Theta = V \qquad \Theta^{-1}H\Theta = H \tag{13.142}$$

L'élément de matrice $T$ s'écrit

$$\begin{aligned} T(\Phi_{\Theta b} \to \Phi_{\Theta a}) &= \Big(\Phi_{\Theta a}, \Big[V_\alpha + V_\alpha \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\eta} V_\beta\Big]\Phi_{\Theta b}\Big) \\ &= \Big(\Theta\Phi_a, \Theta\Theta^{-1}\Big[V_\alpha + V_\alpha \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\eta} V_\beta\Big]\Theta\Phi_b\Big) \\ &= \Big(\Theta\Phi_a, \Theta\Big[V_\alpha + V_\alpha \frac{1}{E - H - \mathrm{i}\eta} V_\beta\Big]\Phi_b\Big) \end{aligned} \tag{13.143}$$

où nous avons utilisé l'antiunitarité de $\Theta$ : $\Theta\,\mathrm{i}\,\Theta^{-1} = -\mathrm{i}$. Cette antiunitarité implique aussi $(\Theta\varphi, \Theta\psi) = (\psi, \varphi)$ de sorte que (13.143) devient grâce à (13.138)

$$T(\Phi_{\Theta b} \to \Phi_{\Theta a}) = \Big(\Phi_b, V_\beta + V_\beta \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\eta} V_\alpha \Phi_a\Big) = T(a \to b) \tag{13.144}$$

On obtient donc la propriété fondamentale

$$\boxed{T(\Theta b \to \Theta a) = T(a \to b)} \tag{13.145}$$

Cette égalité entraîne la propriété de *microréversibilité* pour les sections efficaces, compte tenu de $v_b = v_{\Theta b}$ et $\mathcal{D}_a = \mathcal{D}_{\Theta a}$

$$v_b \mathcal{D}_b(E) \frac{\mathrm{d}\sigma(\Theta b \to \Theta a)}{\mathrm{d}\Omega_a} = v_a \mathcal{D}_a(E) \frac{\mathrm{d}\sigma(a \to b)}{\mathrm{d}\Omega_b} \tag{13.146}$$

Appliquons (13.145) au cas de la diffusion élastique de particules de spin zéro

$$T(a \to b) = T(\vec{k}_a \to \vec{k}_b) = T(\vec{k}_b, \vec{k}_a)$$

Dans ce cas, la propriété de symétrie (13.145) devient

$$T(\vec{k}_b, \vec{k}_a) = T(-\vec{k}_a, -\vec{k}_b) \tag{13.147}$$

Si, de plus, le potentiel est invariant par parité, on obtient

$$T(-\vec{k}_b, -\vec{k}_a) = T(\vec{k}_b, \vec{k}_a) \tag{13.148}$$

et en combinant les deux symétries

$$T(\vec{k}_b, \vec{k}_a) = T(\vec{k}_a, \vec{k}_b) \tag{13.149}$$

Ces résultats sont illustrés sur la figure 13.7. La collision $(\vec{k}_b \to \vec{k}_a)$ est appelée *collision inverse* de $(\vec{k}_a \to \vec{k}_b)$, et (13.149) montre que les éléments de matrice $T$ de la collision directe et de la collision inverse sont égaux. Ce n'est pas nécessairement le cas pour des collisions de particules de spin non nul. Au premier ordre de la théorie des perturbations, ou de façon équivalente

à l'approximation de Born (13.136), les élements de matrice $T$ sont donnés par $T_{ba} = \langle b|V|a\rangle$ et $T_{ab} = \langle a|V|b\rangle = \langle b|V|a\rangle^*$. La section efficace étant proportionnelle à $|T_{ab}|^2 = |T_{ba}|^2$, les sections efficaces du processus direct et du processus inverse se déduisent l'une de l'autre à cet ordre. Ainsi que nous venons de l'observer, cela n'est pas nécessairement vrai à tous les ordres du développement de Born.

## 13.6 Exercices

### 13.6.1 Pic de Gamow

**1.** On se propose d'évaluer la section efficace de la réaction

$$^2\mathrm{H} + {}^3\mathrm{H} \to {}^4\mathrm{He} + n \tag{13.150}$$

à l'intérieur d'une étoile où règne une température de l'ordre de $10^7$ K. Cette réaction particulière a été choisie pour fixer les idées, mais ce qui suit s'applique à toute réaction nucléaire dans une étoile. Montrer que l'énergie cinétique des noyaux incidents $^2$H et $^3$H est de l'ordre du keV. Pourquoi les atomes sont-ils complètement ionisés ? En physique nucléaire, la relation suivante est souvent utile : dans un système d'unités où $\hbar = c = 1$, la relation entre le fermi et le MeV s'écrit

$$1\,\mathrm{fm}^{-1} \simeq 200\,\mathrm{MeV}$$

Vérifier cette relation. Le potentiel $V(r)$ entre les deux noyaux incidents est le potentiel coulombien répulsif $V(r) = e^2/r$ pour $r > R$ et un potentiel nucléaire attractif pour $r \leq R$, avec $R \simeq 1$ fm. Montrer que $e^2/R$ est très grand par rapport à l'énergie cinétique $E$ des noyaux incidents.

**2.** Montrer qu'en physique classique les deux noyaux ne peuvent pas s'approcher à une distance plus faible que $r_0 = e^2/E$, et la réaction nucléaire (13.150) ne peut se produire. En physique quantique, la réaction est possible grâce à l'effet tunnel. En utilisant (12.109), montrer que la probabilité d'effet tunnel est

$$\mathsf{p}_T(E) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_R^{r_0}\left[2\mu\left(\frac{e^2}{r} - E\right)\right]^{1/2}\mathrm{d}r\right)$$

où $\mu$ est la masse réduite : $E = \mu v^2/2$, $v$ étant la vitesse relative des deux noyaux. Montrer que $\mu \simeq (6/5)m_p$, où la masse du proton $m_p \simeq 940\,\mathrm{MeV/c^2}$. Pour calculer $\mathsf{p}_T(E)$, on pourra faire le changement de variables

$$u^2 = \frac{e^2}{r} - E$$

On donne l'intégrale indéfinie

$$\int \frac{u^2\mathrm{d}u}{(u^2+a^2)^2} = \frac{1}{2a}\tan^{-1}\frac{u}{a} - \frac{u}{2(u^2+a^2)}$$

En déduire

$$\mathsf{p}_T(E) \simeq \exp\left(-\sqrt{\frac{E}{E_B}}\right) \qquad E_B = 2\pi^2\alpha^2\mu c^2$$

avec $\alpha = e^2/(\hbar c) \simeq 1/137$. Donner la valeur de $E_B$ en MeV.

**3.** Justifier la forme approchée de la section efficace de la réaction (13.150)

$$\sigma(E) \sim \frac{4\pi}{k^2}\,\mathsf{p}_T(E)$$

en admettant que la réaction nucléaire se produit dès que les noyaux entrent en contact ; $k$ est le vecteur d'onde $E = \hbar^2k^2/(2\mu)$.

**4.** D'après (13.1), le nombre de réactions nucléaires (13.150) par unité de temps est $n_i n_c v\sigma(v)$, où $n_i$ et $n_c$ sont les densités de noyaux incidents et de noyaux cibles. Cependant, les vitesses n'ont pas une valeur fixée, et pour obtenir le taux de réaction dans l'étoile, il faut moyenner sur la distribution de Maxwell des vitesses

$$\mathsf{p}_M(v) = \left(\frac{\mu}{2\pi k_BT}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2k_BT}\right)$$

La quantité physiquement pertinente est la moyenne $\langle v\sigma\rangle$. En intégrant sur les angles, montrer que

$$\langle v\sigma\rangle = 4\pi\left(\frac{\mu}{2\pi k_BT}\right)^{3/2}\int_0^\infty \mathrm{d}v\, v^3\sigma(v)\exp\left(-\frac{\mu v^2}{2k_BT}\right)$$

En déduire, en effectuant le changement de variables $v \to E$

$$\langle v\sigma\rangle = \frac{16\pi^2\hbar^2}{\mu^3}\left(\frac{\mu}{2\pi k_BT}\right)^{3/2}\int_0^\infty \mathrm{d}E\, \mathrm{e}^{-E/(k_BT)}\mathrm{e}^{-\sqrt{E_B/E}} \qquad (13.151)$$

Montrer que l'intégrand dans (13.72) exhibe un pic aigu pour une valeur $E = E_0$ de l'énergie, avec

$$E_0 = \left(\frac{1}{2}\,k_BT\sqrt{E_B}\right)^{2/3}$$

et que la largeur $\Delta E$ de ce pic est donnée par

$$\Delta E \propto E_B^{1/6}(k_BT)^{5/6}$$

Ce pic est appelé *pic de Gamow*, et il détermine l'énergie $E_0$ pour laquelle la réaction (13.150) a une probabilité maximale : le taux de réaction dans l'étoile est contrôlé par $E_0$. Estimer numériquement la position du pic et sa largeur.

### 13.6.2 Diffusion de neutrons de basse énergie par une molécule d'hydrogène

**1.** On considère dans un premier temps la diffusion d'une particule par les deux noyaux 1 et 2 supposés différents d'une molécule diatomique, sans tenir compte du spin. Le centre de la molécule est situé à l'origine des coordonnées, et le détecteur à une distance $r$ de la cible. Les noyaux 1 et 2 sont situés aux points $\vec{R}/2$ et $-\vec{R}/2$, avec $R \ll r$. Montrer que l'amplitude de diffusion par la molécule est

$$f = a_1 \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2}\,\vec{q}\cdot\vec{R}\right) + a_2 \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{2}\,\vec{q}\cdot\vec{R}\right)$$

où $\vec{k}$ est le vecteur d'onde des particules incidentes, $\vec{k}\,' = k\hat{r}$, $\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k}\,' - \vec{k})$ le transfert d'impulsion, tandis que $a_1$ et $a_2$ sont les longueurs de diffusion sur les noyaux 1 et 2. Tracer la section efficace en fonction de l'angle $\theta$ entre $\vec{k}\,'$ et $\vec{k}$ lorsque $qR \sim 1$.

**2.** On se place dans le cas de la diffusion de neutrons par une molécule d'hydrogène en tenant compte du spin du neutron et des protons. On suppose l'énergie suffisamment basse pour que $qR \ll 1$. Quelle doit être la valeur de l'énergie en eV pour que cette condition soit réalisée ? Si les neutrons sont produits dans un réacteur, à quelle température doivent-ils être refroidis (*cf.* § 1.4.2) ? On définit le spin total $\vec{S}$ de la molécule

$$\hbar\vec{S} = \frac{1}{2}\,\hbar(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)$$

$\vec{\sigma}_1$ et $\vec{\sigma}_2$ sont les matrices de Pauli décrivant les spins des deux protons. Montrer que l'amplitude de diffusion s'écrit dans l'espace des spins en fonction des longueurs de diffusion $a_s$ et $a_t$

$$\hat{f} = \frac{1}{2}(a_s + 3a_t)I + \frac{1}{2}(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{S})$$

**3.** Si l'on traite l'interaction neutron-proton au moyen d'un potentiel effectif (13.41), la constante $g$ est fixée par les caractéristiques du potentiel. En déduire qu'en raison d'un effet de masse réduite, on doit utiliser $4a/3$ comme longueur de diffusion sur les protons liés dans une molécule d'hydrogène, si $a$ est la longueur de diffusion d'un neutron sur un proton libre. La section efficace est donc à multiplier par un facteur 16/9 : c'est l'effet de liaison chimique. Cet effet de masse réduite est présent pourvu que l'énergie du neutron soit suffisamment faible pour ne pas pouvoir exciter les niveaux de vibration de la molécule.

**4.** La molécule d'hydrogène peut exister dans deux états de spin : le parahydrogène de spin zéro et l'orthohydrogène de spin un. Quelle est la section efficace totale neutron-parahydrogène ? Est-elle sensible au signe de $a_s$ ?

**5.** Calculer la section efficace totale neutron-orthohydrogène en supposant la molécule non polarisée. Suggestion

$$\mathrm{Tr}(A \otimes B)^2 = (\mathrm{Tr}\, A^2)(\mathrm{Tr}\, B^2)$$

### 13.6.3 Propriétés analytiques de l'amplitude de diffusion neutron-proton

L'objectif de cet exercice est de relier les propriétés des états liés et des résonances à l'amplitude de diffusion. On se limitera à l'onde $s$. On négligera la différence de masse neutron-proton et on définira $M \simeq m_p \simeq m_n$ : la masse réduite est donc $M/2$. On néglige tout effet lié au spin.

**1.** Soit $u(r)$ la fonction d'onde radiale (réelle) d'un état lié, en l'ocurrence le deutéron. Elle est caractérisée par son comportement asymptotique et sa normalisation $N$

$$r \to \infty \qquad u(r) \simeq N\mathrm{e}^{-\kappa r} \quad \text{avec} \quad \int_0^\infty u^2(r)\,\mathrm{d}r = 1$$

Montrer que dans le cas du puits sphérique de la figure 13.4, de portée $R$ et de profondeur $V_0$

$$N^2 = \frac{2\kappa k'^2\,\mathrm{e}^{2\kappa r}}{(\kappa^2 + k'^2)(1+\kappa R)}$$

avec $k' = \sqrt{M(V_0 - B)}$, $\kappa = \sqrt{MB}$, $B$ étant l'énergie de liaison. Tracer qualitativement $u(r)$.

**2.** Soit $g(k,r)$, une solution de l'équation radiale se comportant asymptotiquement comme

$$r \to \infty \ : \qquad g(k,r) \propto \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr} \quad \text{avec} \quad k = \frac{\sqrt{ME}}{\hbar}$$

Montrer que la fonction d'onde $u(k,r)$ est donnée par

$$u(k,r) = g(-k,r)g(k) - g(k,-r)g(-k) \qquad g(k) = g(k, r=0)$$

et que l'élément de matrice $S$, $S(k)$ vaut

$$S(k) = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta(k)} = \frac{g(k)}{g(-k)}$$

**3.** On prolonge analytiquement $g(k,r)$ à des valeurs complexes de $k$. Montrer que

$$g^*(k,r) = g(-k^*,r) \qquad S^*(k^*) = \frac{1}{S(k)} = S(-k)$$

**4.** Calculer $g(k)$ et $S(k)$ pour le puits sphérique et montrer que $g(k)$ est une fonction entière de $k$ (c'est-à-dire analytique pour tout $k$).

**5.** On peut prouver que pour un potentiel décroissant plus vite que $\exp(-\mu r)$ lorsque $r \to \infty$, $g(k)$ est analytique dans le demi-plan $\mathrm{Im}\, k < \mu/2$, et on admettra ce résultat dans la suite de l'exercice. Montrer que si $S(k)$ a un pôle sur l'axe imaginaire, $k = \mathrm{i}\kappa, 0 < \kappa < \mu/2$, alors ce pôle correspond à un état lié du potentiel. Montrer que si $S(k)$ a un pôle à $k = h - \mathrm{i}b$, $|b| < \mu/2$, alors nécessairement $b > 0$.

**6.** Le cas du pôle à $k = h - \mathrm{i}b$, $b > 0$, est celui d'une *résonance*. Montrer qu'un choix pour $S(k)$ satisfaisant aux conditions de la question **3** est

$$S(k) = \frac{(k - h - \mathrm{i}b)(k + h - \mathrm{i}b)}{(k - h + \mathrm{i}b)(k + h + \mathrm{i}b)} \simeq \frac{k - h - \mathrm{i}b}{k - h + \mathrm{i}b} \quad \text{pour } k \sim h$$

Supposant $b \ll h$, déterminer le comportement du déphasage $\delta(k)$ en fonction de $k$ en montrant que

$$\cot \delta = \frac{h - k}{b}$$

En déduire que $\delta$ passe par $\pi/2$ pour $k = h$ et que la section efficace se met sous la forme dite de *Breit-Wigner*

$$\sigma(E) = \frac{2\pi\hbar^2}{ME} \frac{\hbar^2\Gamma^2/4}{(E - E_0)^2 + \hbar^2\Gamma^2/4} \tag{13.152}$$

Relier $E_0$ et $\Gamma$ à $b$ et $h$. Montrer que $h = 0$ correspond à un état virtuel.

**7.** Démontrer la relation

$$\left[u' \frac{\partial u}{\partial k} - u \frac{\partial u'}{\partial k}\right]_0^r = 2k \int_0^r u^2(r')\mathrm{d}r' \qquad u' = \frac{\partial u}{\partial r}$$

En étudiant cette relation pour $r \to 0$ et $r \to \infty$, montrer qu'au voisinage du pôle $k = \mathrm{i}\kappa$

$$S(k) \simeq \frac{-\mathrm{i}N^2}{k - \mathrm{i}\kappa}$$

**8.** Montrer que la fonction

$$k \cot \delta(k) = \mathrm{i}k \frac{g(k) + g(-k)}{g(k) - g(-k)}$$

est analytique en $k$ au voisinage de $k = 0$, tend vers une constante pour $k \to 0$ et est une fonction paire de $k$. En déduire que l'on peut écrire

$$k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 + O(k^4)$$

Démontrer les relations

$$r_0 = \frac{2}{\kappa}\left(1 - \frac{1}{\kappa a}\right) \qquad N^2 = \frac{2\kappa}{1 - \kappa r_0}$$

qui relient les paramètres $(\kappa, N)$ du deutéron aux caractéristiques $(a, r_0)$ de la diffusion de basse énergie. Calculer $r_0$ sachant que $B = 2.22\,\mathrm{MeV}$ et $a = 5.40\,\mathrm{fm}$, et comparer au résultat expérimental $r_0 = 1.73\,\mathrm{fm}$.

### 13.6.4 Approximation de Born

**1.** Calculer l'amplitude de diffusion $f_B(\vec{q})$, $\vec{q} = \vec{k}\,' - \vec{k}$, à l'approximation de Born lorsque le potentiel a la forme dite de Yukawa

$$V(r) = V_0\,\frac{\mathrm{e}^{-\mu r}}{\mu r}$$

En déduire $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ et $\sigma_{\mathrm{tot}}$.

**2.** Examiner la limite $\mu \to 0$ avec $V_0/\mu \to e^2$ =cste : le potentiel de Yukawa tend vers le potentiel coulombien $V(r) = e^2/r$. Montrer que

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{e^4}{16E^2\sin^4\theta/2} \tag{13.153}$$

où $E = \hbar^2 k^2/(2m)$ est l'énergie incidente. Ce résultat a été obtenu par Rutherford en utilisant un raisonnement de mécanique classique (la mécanique quantique n'existait pas encore !), et il est appelé *section efficace de Rutherford*. C'est aussi le résultat obtenu par un traitement rigoureux du potentiel coulombien en mécanique quantique. Il est remarquable que l'approximation de Born, dont la validité est plus que douteuse dans ce cas, donne le résultat correct pour la section efficace (mais non pour l'amplitude $f(\theta)$).

### 13.6.5 Optique neutronique

**1.** *Diffusion par une lame mince.* On considère un faisceau de neutrons de basse énergie de vecteur d'onde $k$ dans le vide, qui traverse une lame très mince d'épaisseur $\delta$ perpendiculairement à cette lame ; dans un premier temps, on néglige les effets liés au spin. Les neutrons sont détectés après leur passage dans la lame en un point d'ordonnée $z$ sur l'axe $Oz$ perpendiculaire à la lame, l'origine $O$ étant choisie au centre de la lame. Si un neutron est diffusé par un noyau de la lame situé à une distance $s$ de $O$, montrer que l'amplitude de probabilité pour observer le neutron diffusé en $z$ est

$$\varphi_s = -\frac{a}{r}\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr} \qquad\qquad r = \sqrt{s^2 + z^2}$$

où $a$ est la longueur de diffusion. L'amplitude de probabilité pour trouver un neutron en $z$ est la somme de l'onde incidente $\exp(\mathrm{i}kz)$ et de l'onde diffusée par la lame

$$\varphi(z) = \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kz} - a\sum\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

où la somme porte sur tous les noyaux de la lame ; en déduire

$$\varphi(z) = \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kz} - 2\pi a\rho\,\delta\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{\mathrm{i}k}\bigg|_z^\infty$$

où $\rho$ est la densité volumique de noyaux. La limite $r \to \infty$ donne un résultat nul si l'on moyenne sur les oscillations et on en déduit

$$\varphi(z) = \left(1 - 2\mathrm{i}\pi \, \frac{a\rho\,\delta}{k}\right) \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kz}$$

**2.** *Indice de réfraction.* Lorsque les neutrons traversent la lame, celle-ci se comporte comme un milieu d'indice de réfraction $n$, qui, comme en optique, transforme le vecteur d'onde $k \to k' = nk$ ou de façon équivalente la longueur d'onde $\lambda \to \lambda' = \lambda/n$. En comparant avec le résultat de la question **1** lorsque $(n-1)k\delta \ll 1$, déduire

$$n = 1 - \frac{2\pi a\rho}{k^2} = 1 - \frac{a\rho\lambda^2}{2\pi}$$

Lorsque $n < 1$, un faisceau de neutrons arrivant en incidence quasi-rasante sur la surface plane d'un cristal peut subir une réflexion totale (la différence d'indice entre le vide et l'air est négligeable) : si l'angle d'incidence est $(\pi/2 - \theta)$, $\theta \ll 1$, montrer que l'incidence critique est

$$\theta_c = \lambda \left(\frac{\rho a}{\pi}\right)^{1/2}$$

Estimer numériquement $\theta_c$ pour des valeurs typiques : $\lambda = 1\,\mathrm{nm}$, $\rho = 10^{29}\,\mathrm{m}^{-3}$ et $a = 10\,\mathrm{fm}$. La propriété de réflexion totale est utilisée pour construire des guides de neutrons, qui font partie des instruments de base de l'optique neutronique.

**3.** *Effets de spin : noyaux de spin 1/2.* Dans les questions suivantes, on étudie les effets liés au spin des neutrons et des noyaux. Reprenant les résultats de l'exercice 3.3.9 et utilisant (13.46), montrer que les amplitudes $f_a$, $f_b$ et $f_c$ de cet exercice sont données en fonction des longueurs de diffusion triplet $a_t$ et singulet $a_s$ pour des noyaux de spin 1/2 par

$$f_a = -\frac{1}{2}(a_t + a_s) \qquad f_b = -\frac{1}{2}(a_t - a_s) \qquad f_c = -a_t$$

Montrer que l'intensité diffusée par le cristal est

$$\mathcal{I} = \frac{1}{16}(3a_t + a_s)^2 \sum_{i,j} \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{q}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + \frac{3\mathcal{N}}{16}(a_t - a_s)^2$$

où $\mathcal{N}$ est le nombre de noyaux diffuseurs. Le premier terme de $\mathcal{I}$ correspond à une diffusion cohérente et le second à une diffusion incohérente (exercice 1.6.7). On définit une section efficace cohérente et une section efficace incohérente en intégrant $\mathcal{I}$ sur les angles

$$\sigma_{\mathrm{coh}} = \frac{\pi}{4}(3a_t + a_s)^2 \qquad \sigma_{\mathrm{inc}} = \frac{3\pi}{4}(a_t - a_s)^2$$

Dans le cas de la diffusion par l'hydrogène, $a_t = 5.4\,\text{fm}$ et $a_s = -23.7\,\text{fm}$. Évaluer numériquement $\sigma_{\text{coh}}$ et $\sigma_{\text{inc}}$ et montrer que $\sigma_{\text{inc}} \gg \sigma_{\text{coh}}$. Cette propriété est particulière à l'hydrogène, car en général les deux sections efficaces sont du même ordre de grandeur. Montrer que la longueur de diffusion à utiliser dans le calcul de l'indice de réfraction est celle définie par la diffusion cohérente

$$a_{\text{eff}} = \frac{3}{4}\,a_t + \frac{1}{4}\,a_s$$

Quelle est l'interprétation physique des poids $3/4$ et $1/4$ ? Quel est le signe de $a_{\text{eff}}$ pour l'hydrogène ? Peut-on obtenir une réflexion totale des neutrons sur de l'hydrogène liquide ?

**4.** *Diffusion par des noyaux de spin $j$.* On suppose que les noyaux diffuseurs ont un spin $j$ ; soit

$$\vec{I} = \vec{J} + \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}$$

le moment angulaire total du système noyau+neutron, $\hbar\vec{\sigma}/2$ étant l'opérateur de spin du neutron. Montrer que l'amplitude de diffusion noyau+neutron s'écrit dans l'espace des spins en fonction de deux longueurs $a$ et $b$

$$-\hat{f} = a + \frac{b}{\hbar}\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{J}\right)$$

Soit $a_+ = a_{j+1/2}$ et $a_- = a_{j-1/2}$, les deux longueurs de diffusion correspondant aux diffusions dans les états de moment angulaire total $i_\pm = j \pm 1/2$. Montrer que

$$a_+ = a + bj \qquad\qquad a_- = a - b(j+1)$$

et inversement

$$a = \frac{1}{2j+1}\,[(j+1)a_+ + ja_-] \qquad\qquad b = \frac{1}{2j+1}[a_+ - a_-]$$

**5.** *Diffusions cohérente et incohérente.* Si les noyaux et les neutrons ne sont pas polarisés, quelles sont les probabilités que la diffusion ait lieu dans les états $i_+ = j + 1/2$ et $i_- = j - 1/2$ ? En utilisant les résultats de l'exercice 1.6.7, montrer que les sections efficaces cohérente et incohérente sont données par

$$\sigma_{\text{coh}} = \frac{4\pi}{(2j+1)^2}\,[(j+1)a_+ + ja_-]^2 = 4\pi a^2$$

$$\sigma_{\text{inc}} = \frac{4\pi j(j+1)}{(2j+1)^2}[a_+ - a_-]^2 = 4\pi j(j+1)b^2$$

Vérifier que l'on retrouve bien les résultats de la question **3** lorsque $j = 1/2$.

### 13.6.6 Section efficace d'absorption de neutrinos

L'objectif de l'exercice est de calculer la section efficace d'absorption des neutrinos par des neutrons

$$\overline{\nu} + p \to n + e^+$$

à partir de la vie moyenne du neutron, qui se désintègre suivant la réaction (1.2)

$$n \to p + e^- + \overline{\nu}$$

Ce calcul est possible car l'interaction responsable des deux phénomènes est la même, l'interaction faible, et les deux processus peuvent être reliés. L'élément de matrice de transition pour le calcul de la vie moyenne du neutron peut s'écrire

$$T_{fi} = G_F \mathcal{M}_{fi} \langle \varphi_f | \varphi_i \rangle$$

où les fonctions d'onde de l'état initial et de l'état final sont des ondes planes normalisées dans un volume $\mathcal{V}$ et de la forme

$$\frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

$G_F$ est *la constante de Fermi*, ou constante de couplage des interactions faibles, $\mathcal{M}_{fi}$ un élément de matrice sans dimensions dépendant des spins[16]. On appelle $E_0 = (m_n - m_p)c^2 \simeq 1.2\,\mathrm{MeV}$, l'énergie disponible dans la désintégration (on peut prendre à une excellente approximation $m_\nu = 0$). Soit $\vec{p}_n = 0$ (supposant le neutron immobile), $\vec{P} = \vec{p}_p$, $\vec{p} = \vec{p}_e$ et $\vec{q} = \vec{p}_\nu$ les impulsions dans l'état initial et dans l'état final, $K = P^2/(2m_p)$, $E$ et $cq$ l'énergie cinétique du proton et l'énergie totale de l'électron et du neutrino. La conservation de l'énergie-impulsion s'écrit

$$\vec{P} + \vec{p} + \vec{q} = 0 \qquad\qquad K + E + cq = E_0$$

Montrer que l'on peut négliger $K$ : $K \ll E,\, cq$. Soit $\mathrm{d}\Gamma/\mathrm{d}E$, la probabilité de désintégration du neutron, par unité d'énergie $E$ de l'électron final. On peut montrer qu'il n'y a pas de corrélations entre l'impulsion de l'électron et celle du neutrino. Montrer que, dans ces conditions, la probabilité de transition s'écrit en fonction de la densité d'états $\mathcal{D}$ de l'électron et du neutrino

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}E} &= \frac{2\pi}{\hbar}\, G_F^2 \langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle\, \mathcal{V}^{-2}\, \mathcal{D}_e(E)\mathcal{D}_\nu(E - E_0)\\ &= \frac{2\pi}{\hbar}\, G_F^2 \langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle \left[\frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3}\, \frac{pE}{c^2}\right] \left[\frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3}\, \frac{(E_0 - E)^2}{c^3}\right]\end{aligned}$$

16. $\mathcal{M}_{fi}$ dépend aussi de deux constantes sans dimension de l'ordre de 1, $g_V = 1$, la constante de couplage vectorielle, et $g_A = 1.25$, la constante de couplage axiale.

$\langle|\mathcal{M}_{fi}|^2\rangle$ représente la somme sur les spins finaux et la moyenne sur les spins initiaux de l'élément de matrice de spin. Pour obtenir la vie moyenne $\tau = 1/\Gamma$, il faut intégrer sur $E$. L'intégrale

$$I(E_0) = \int_{m_e c^2}^{E_0} \mathrm{d}E\, E(E_0 - E)^2 \sqrt{E^2 - m_e^2 c^2}$$

peut se calculer exactement, mais nous nous contenterons d'une approximation ultrarelativiste négligeant la masse de l'électron

$$I(E_0) \simeq \int_0^{E_0} \mathrm{d}E\, E^2(E_0 - E)^2 = \frac{E_0^5}{30}$$

En déduire l'expression de la vie moyenne

$$\frac{1}{\tau} = \Gamma \sim \frac{G_F^2 E_0^5}{60\pi^3 \hbar(\hbar c)^6}$$

Quelle est la dimension de $G_F/(\hbar c)^3$ ? Estimer $G_F$ à partir de la vie moyenne $\tau \simeq 880\,\mathrm{s}$ et comparer avec la valeur précise

$$\frac{G_F}{(\hbar c)^3} = 1.17 \times 10^{-5}\,\mathrm{GeV}^{-2}$$

**2.** Montrer que la section efficace différentielle d'absorption des neutrinos par les neutrons est donnée par

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar c}\, G_F^2 \langle|\mathcal{M}_{fi}|^2\rangle \frac{Ep}{(2\pi\hbar)^3 c^2}$$

où $E$ est l'énergie du positron $e^+$ et en déduire

$$\sigma_{\mathrm{tot}} \sim \frac{1}{\pi}\left[\frac{G_F}{(\hbar c)^3}\right]^2 (\hbar c)^2 E^2$$

Vérifier que $\sigma_{\mathrm{tot}}$ a bien les dimensions d'une surface. Estimer numériquement $\sigma_{\mathrm{tot}}$ pour des neutrinos solaires de 8 MeV, et en déduire que le libre parcours moyen des neutrinos solaires dans la Terre se mesure en années-lumière.

**3.** La théorie de Fermi utilisée dans cet exercice donne une section efficace isotrope : l'interaction a lieu uniquement dans l'onde $s$, $l = 0$. En utilisant (13.51), montrer que le résultat obtenu pour la section efficace d'absorption ne peut pas être valable à très haute énergie et estimer l'énergie au-delà de laquelle la théorie de Fermi doit être modifiée. Cette modification est connue, c'est la théorie électro-faible de Glashow-Salam-Weinberg, composante du modèle standard qui unifie interactions faibles et électromagnétiques, et où la constante de Fermi est reliée à la charge de l'électron et à la masse des bosons $W^{\pm}$ et $Z^0$ : $G_F \sim e^2/M_W^2$.

### 13.6.7 Non hermiticité de $H_0$

**1.** On se propose de montrer que le hamiltonien libre $H_0$ pris entre une onde plane $\varphi_b$ et une onde sphérique sortante $\psi_a^{(+)}$ n'est pas hermitien. Montrer que

$$\begin{aligned}\Delta &= \left(\varphi_b, H_0\psi_a^{(+)}\right) - \left(H_0\varphi_b, V\psi_a^{(+)}\right)\\ &= (E_a - E_b)\left(\varphi_b, \psi_a^{(+)}\right) - \left(\varphi_b, V\psi_a^{(+)}\right)\end{aligned}$$

Si $H_0$ était hermitien, on aurait $\Delta = 0$. Mais ce n'est pas le cas car $\varphi_b$ et $\psi_a^{(+)}$ ne décroissent pas assez vite à l'infini. Si $E_a = E_b$, montrer que

$$\Delta = -\left(\varphi_b, V\psi_a^{(+)}\right) = -T_{ba}$$

et que $\Delta = 0$ si $E_a \neq E_b$. Le problème de l'hermiticité de $VH_0$ par exemple ne se pose pas, car la décroissance rapide de $V$ pour $r \to \infty$ assure cette hermiticité.

**2.** Montrer que pour des fonctions arbitraires $\chi_a$ et $\chi_b$

$$(\chi_b, H_0\chi_a) - (H_0\chi_b, \chi_a) = -\frac{\hbar^2}{2m}W(\chi_b^*, \chi_a)$$

(voir (13.129)). Retrouver les résultats de **1** en posant $\chi_a = \psi_a^{(+)}$ et $\chi_b = \varphi_b$ et en utilisant les formes asymptotiques.

### 13.6.8 Unitarité et théorème optique

**1.** On se propose de montrer la relation d'unitarité (13.58) en suivant le canevas de la démonstration donnée au § 13.4.2. Soit $\psi_{\vec{k}}$ et $\psi_{\vec{k}'}$ deux solutions de l'équation de Schrödinger d'énergie $E = \hbar^2k^2/2m = \hbar^2k'^2/2m$ avec un potentiel qui peut être complexe $V(\vec{r})$

$$\begin{aligned}(\nabla^2 + k^2)\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\\ (\nabla^2 + k^2)\psi^*_{\vec{k}'}(\vec{r}) &= \frac{2m}{\hbar^2}V^*(\vec{r})\psi^*_{\vec{k}'}(\vec{r})\end{aligned}$$

En multipliant la première équation par $\psi^*_{\vec{k}'}$ et la seconde par $\psi_{\vec{k}}$, déduire

$$\psi^*_{\vec{k}'}\nabla^2\psi_{\vec{k}} - \psi_{\vec{k}}\nabla^2\psi^*_{\vec{k}'} = \frac{4\mathrm{i}m}{\hbar^2}\mathrm{Im}\,V(\vec{r})\psi_{\vec{k}}\psi^*_{\vec{k}'}$$

**2.** Pour évaluer

$$W(\psi^*_{\vec{k}'}, \psi_{\vec{k}}) = \lim_{R\to\infty}\int\left(\psi^*_{\vec{k}'}\frac{\partial\psi_{\vec{k}}}{\partial r} - \psi_{\vec{k}}\frac{\partial\psi^*_{\vec{k}'}}{\partial r}\right)R^2\mathrm{d}\Omega_r$$

on utilise le comportement asymptotique de $\psi_{\vec{k}} = \psi_{\vec{k}}^{(+)}$ et $\psi^*_{\vec{k}\,'} = [\psi_{\vec{k}\,'}^{(+)}]^*$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \underset{r\to\infty}{\simeq} \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\vec{k}_r, \vec{k})\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}$$
$$\psi^*_{\vec{k}\,'}(\vec{r}) \underset{r\to\infty}{\simeq} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\,'\cdot\vec{r}} + f^*(\vec{k}_r, \vec{k}\,')\,\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}$$

avec $\vec{k}_r = k\hat{r}$. On doit calculer

$$W\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\,'\cdot\vec{r}} + f^*(\vec{k}_r, \vec{k}\,')\,\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}, \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\vec{k}_r, \vec{k})\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}\right)$$

Utiliser la forme asymptotique (13.67) de $\exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r})$ pour montrer que

$$W\Big(f^*(\vec{k}_r, \vec{k}\,')\,\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}, \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\Big) = 4\pi f^*(\vec{k}, \vec{k}\,')$$
$$W\Big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\,'\cdot\vec{r}}, f(\vec{k}_r, \vec{k})\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}\Big) = -4\pi f(\vec{k}\,', \vec{k})$$
$$W\Big(f^*(\vec{k}_r, \vec{k}\,')\,\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}, f(\vec{k}_r, \vec{k})\,\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kr}}{r}\Big) = 2\mathrm{i}k\int f^*(\vec{k}_r, \vec{k}\,')f(\vec{k}_r, \vec{k})\mathrm{d}\Omega_r$$

En déduire (13.58).

**3.** Généralisation. On se place maintenant dans le cas des collisions inélastiques avec des voies $\alpha$, $\beta$, ... et des potentiels $V_\alpha$, $V_\beta$ ... *réels*

$$\Psi_a^{(+)} \underset{r\to\infty}{\simeq} \varphi_\alpha\left[\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}_a\cdot\vec{r}} + f_{\alpha a}(\Omega_\alpha)\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}k_a r}}{r}\right]$$
$$\underset{r\to\infty}{\simeq} \varphi_\gamma f_{\gamma a}(\Omega_\gamma)\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}k_c r}}{r} \qquad \gamma\neq\alpha$$
$$\Psi_b^{(+)} \underset{r\to\infty}{\simeq} \varphi_\beta\left[\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}_b\cdot\vec{r}} + f_{\beta b}(\Omega_\beta)\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}k_b r}}{r}\right]$$
$$\underset{r\to\infty}{\simeq} \varphi_\gamma f_{\gamma b}(\Omega_\gamma)\frac{\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}k_c r}}{r} \qquad \gamma\neq\beta$$

Montrer que

$$\sum_{\nu=\alpha,\beta,\gamma\ldots} W_\nu\Big([\Psi_b^{(+)}]^*, \Psi_a^{(+)}\Big) = 0$$

et en déduire à partir du comportement asymptotique de $\Psi_a^{(+)}$ et $\Psi_b^{(+)}$ la relation

$$\frac{2\pi\hbar^2}{m_\beta}f_{\beta a}(\Omega_\beta) - \frac{2\pi\hbar^2}{m_\alpha}f^*_{\alpha b}(\Omega_\alpha) = \sum_\nu \frac{\mathrm{i}\hbar^2 k_\nu}{m_\nu}\int f^*_{\nu b}(\Omega_\nu)\,f_{\nu a}(\Omega_\nu)\mathrm{d}\Omega_\nu$$

En remplaçant les amplitudes de diffusion $f$ par des éléments de matrice $T$, en déduire la relation d'unitarité (13.140)

$$\frac{1}{2\mathrm{i}}[T_{ba} - T^*_{ab}] = -\pi \sum_\nu \mathcal{D}_\nu(E) \int T^*_{\nu b} T_{\nu a} \mathrm{d}\Omega_\nu$$

**4.** En choisissant $a = b$ dans la relation précédente, et en reliant $|T_{\nu a}|^2$ à la section efficace différentielle $\mathrm{d}\sigma(a \to \nu)/\mathrm{d}\Omega_\nu$, montrer que

$$\sum_\nu \int |T_{\nu a}|^2 \mathcal{D}_\nu(E) \mathrm{d}\Omega_\nu = \frac{\hbar v_a}{2\pi} \sigma_a^{\mathrm{tot}}$$

En déduire le théorème optique

$$\sigma_a^{\mathrm{tot}} = \frac{4\pi}{k_a} \operatorname{Im} f_{aa}(\theta = 0)$$

### 13.6.9 Opérateurs de Møller

**1.** On définit l'opérateur de Møller $\Omega^{(+)}$ par $\psi_a^{(+)} = \Omega^{(+)} \varphi_a$, soit

$$\Omega^{(+)} = I + \frac{1}{E - H_0 + \mathrm{i}\eta} V \Omega^{(+)} = I + \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\eta} V$$

Montrer que

$$\Omega^{(+)} = \sum_n |\psi_n^{(+)}\rangle\langle\varphi_n|$$

En déduire que $\Omega$ est une isométrie

$$(\Omega^{(+)})^\dagger \Omega^{(+)} = I$$

tandis que

$$\Omega^{(+)} (\Omega^{(+)})^\dagger = I - \sum_B |\psi_B\rangle\langle\psi_B|$$

où $\sum_B$ représente une somme sur les états liés.

**2.** Relation avec la matrice $S$. Montrer que

$$S = (\Omega^{(-)})^\dagger\, \Omega^{(+)}$$

**3.** Renversement du sens du temps. Montrer que

$$\Theta \psi_{\vec{k}}^{(+)} = \psi_{-\vec{k}}^{(-)}$$

où $\Theta$ est l'opérateur de renversement du sens du temps, ce qui entraîne

$$\Theta \psi_a^{(+)} = \psi_{\Theta a}^{(-)}$$

En déduire la relation équivalente à (13.145)

$$S_{\Theta b, \Theta a} = S_{ab}$$

## 13.7 Bibliographie

On trouvera un exposé de la théorie des collisions plus complet que celui de ce chapitre dans Messiah [1959], chapitres X et XIX, Rodberg et Thaler [1967] ou Landau et Lifschitz [1966], chapitres XVII et XVIII. La théorie de la diffusion à basse énergie est exposée par Bethe et Morrison [1956], chapitres IX à XI, ou dans Cohen-Tannoudji [1999].

# Chapitre 14

# Particules identiques

En physique classique, il n'existe pas d'identité stricte de deux particules : on peut toujours distinguer deux boules de billard par un trait de peinture sans modifier leurs propriétés mécaniques et, dans une collision, on peut toujours suivre chaque boule individuellement. En revanche, en physique quantique, rien ne permet de distinguer deux électrons, deux protons, deux atomes d'hélium$^4$... : ces particules sont strictement identiques. Toutefois, il convient de faire la distinction entre identiques et indiscernables[1], distinction que nous allons expliquer sur un exemple. À des températures $\lesssim 1\,\mathrm{K}$ et à des pressions $\gtrsim 30\,\mathrm{MPa}$, l'$^3$He est un solide cristallin. Deux atomes d'$^3$He situés en des nœuds différents du réseau sont identiques, mais discernables : leur position dans le réseau permet de les étiqueter. En revanche, dans l'$^3$He liquide, les atomes se déplacent et sont indiscernables. Cette identité/indiscernabilité a des implications remarquables sur la courbe de fusion à des températures $\lesssim 300\,\mathrm{mK}$, parce que le liquide est plus ordonné que le solide (*cf.* par exemple Le Bellac *et al.* [2004], exercice 5.7.6). En d'autres termes, pour que deux particules identiques soient indiscernables, il faut qu'elles puissent se déplacer de façon à "se rendre compte" qu'elles sont identiques. Le spectre de rotation-vibration d'une molécule diatomique homonucléaire (§ 14.1.2) donne un autre exemple de la distinction identité/indiscernabilité. Toutefois, Ginsberg *et al.* [2007] ont montré l'indiscernabilité de deux condensats de Bose-Einstein distants de $160\,\mu$m.

La section 14.1 énonce le postulat de symétrisation, introduit les statistiques quantiques et développe quelques applications simples. La section 14.2 traite la diffusion de particules identiques. Lorsque l'on a affaire à $N$ particules identiques, $N \gg 1$, ou états collectifs de $N$ particules, les effets des statistiques quantiques jouent un rôle crucial à basse température. Nous examinerons les états collectifs de fermions dans la section 14.3 et les états collectifs de bosons dans la section 14.4, en développant l'aspect condensation de Bose-Einstein.

---

1. Selon le *Petit Robert* : entités identiques = entités parfaitement semblables tout en étant distinctes, et indiscernable = qui ne peut être distingué d'une entité de même nature.

# 14.1 Bosons et fermions

## 14.1.1 Symétrie ou antisymétrie du vecteur d'état

Afin d'introduire le concept d'indiscernabilité quantique sur un exemple concret, commençons par le cas de deux particules "presque" identiques, deux atomes d'oxygène $^{16}$O et $^{18}$O, l'analogue du trait de peinture étant le choix de deux isotopes différents pour les noyaux, et considérons un état $|\Psi\rangle$ formé d'un atome d'oxygène $^{16}$O (particule 1) et d'un atome d'oxygène $^{18}$O (particule 2) dans leur état fondamental. Nous appellerons $|a\rangle$ et $|b\rangle$ deux états possibles pour chaque particule. Ce seront, par exemple, des états propres des opérateurs $\vec{P}$, $\vec{J}, \ldots$ étiquetés par l'impulsion $\vec{p}$ de l'atome, la composante $j_z$ de son spin[2], ...

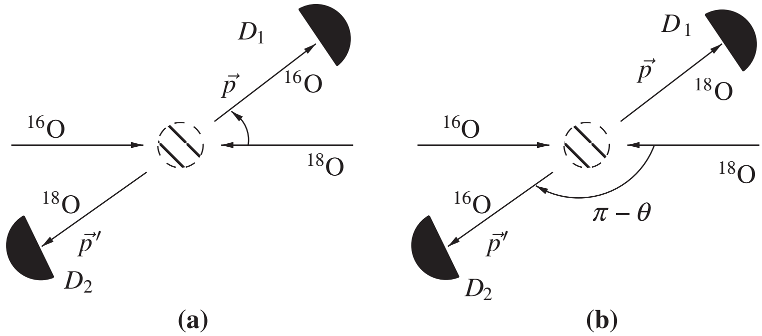



FIG. 14.1 – Diffusion $^{16}$O-$^{18}$O. (a) Angle de diffusion $\theta$. (b) Angle de diffusion $(\pi - \theta)$.

$$|a\rangle = |\vec{p}, j_z, \ldots\rangle \qquad |b\rangle = |\vec{p}\,', j_z', \ldots\rangle$$

Nous noterons $|a_1 \otimes b_2\rangle$ l'état à deux particules où la particule 1 est dans l'état $|a\rangle$ et la particule 2 dans l'état $|b\rangle$, par exemple[3] $|a_1 \otimes b_2\rangle = |\vec{p}(1) \otimes \vec{p}\,'(2)\rangle$. Pour fixer les idées, on peut supposer que les particules ont interagi par exemple dans une collision (figure 14.1) et qu'elles se trouvent dans un état intriqué $|\Psi\rangle$. Les tests effectués sur les particules 1 et 2 sont bien individualisés, les deux tests s'effectuant dans des régions d'espace très éloignées, comme dans les expériences discutées dans la section 11.2. Deux détecteurs $D_1$ et $D_2$ permettent de déterminer $\vec{p}, j_z, \ldots$ pour chacune des deux particules : $D_1$ détecte l'atome de $^{16}$O avec une impulsion $\vec{p}$, $D_2$ détecte l'atome de $^{18}$O avec

2. Les atomes de $^{16}$O et de $^{18}$O ont un spin 2 (état $^3P_2$, *cf.* § 16.2.2) et l'état fondamental est 5 fois dégénéré. Si nécessaire, on peut lever cette dégénérescence par effet Zeeman dans un champ magnétique.

3. Nous avons procédé à une légère modification de la notation, car la notation $|\vec{p}_1 \otimes \vec{p}\,'_2\rangle$ pourrait être ambiguë : la particule 1 est dans l'état d'impulsion $\vec{p}$, et non $\vec{p}_1$.

une impulsion $\vec{p}'$ (figure 14.1a), ce qui permet d'effectuer un test $|a_1 \otimes b_2\rangle$ sur l'état $|\Psi\rangle$. La probabilité pour que l'état $|\Psi\rangle$ passe le test $|a_1 \otimes b_2\rangle$ est

$$\mathsf{p}_{\Psi \to [a_1, b_2]} = |\langle a_1 \otimes b_2 | \Psi \rangle|^2 \tag{14.1}$$

On peut aussi envisager la configuration inverse et mesurer la probabilité que le détecteur $D_1$ enregistre l'atome de $^{18}$O et $D_2$ l'atome de $^{16}$O (figure 14.1b), qui est *différente* de (14.1a) : cette probabilité correspond au test $|a_2 \otimes b_1\rangle$, où l'atome de $^{18}$O a une impulsion $\vec{p}$ et l'atome de $^{16}$O une impulsion $\vec{p}'$, et sauf cas particulier

$$\mathsf{p}_{\Psi \to [a_2, b_1]} \neq \mathsf{p}_{\Psi \to [a_1, b_2]}$$

Supposons maintenant les particules 1 et 2 identiques, deux atomes de $^{16}$O, par exemple. Comme il n'est pas possible de les suivre dans la collision, elles sont non seulement identiques, mais aussi indiscernables. Si les énergies mises en jeu dans l'interaction entre les deux particules sont de quelques eV, rien ne distingue *a priori* ce cas du cas précédent, car les interactions $^{16}$O-$^{18}$O et $^{16}$O-$^{16}$O sont strictement identiques. Ce n'est qu'à des énergies de l'ordre du MeV que des différences dues aux noyaux pourraient se faire sentir, et pourtant *les deux cas vont différer de façon radicale*, même à basse énergie. Lorsque les deux particules sont identiques, cela n'a plus de sens de parler du test $|a_1 \otimes b_2\rangle$ : il peut être commode de numéroter formellement les deux particules, et donc de parler des tests $|a_1 \otimes b_2\rangle$ ou $|a_2 \otimes b_1\rangle$, mais une telle numérotation n'a pas de signification physique. Il n'est pas physiquement acceptable d'écrire un état de la forme $|a_1 \otimes b_2\rangle$ (sauf éventuellement si $a \equiv b$), car on ne peut pas affirmer que la particule 1 est dans l'état $a$ et la particule 2 dans l'état $b$ ou l'inverse, étant donné que l'on ne peut pas les distinguer. Le problème se pose donc de la définition correcte de l'état $|a \otimes b\rangle$. Cet état doit être physiquement identique à $|b \otimes a\rangle$ et ne peut en différer que par une phase, qui dépend éventuellement de $a$ et de $b$

$$\begin{aligned} |a \otimes b\rangle &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{ab}}\, |b \otimes a\rangle \\ |b \otimes a\rangle &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{ba}}\, |a \otimes b\rangle \end{aligned} \tag{14.2}$$

On en déduit[4]

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{ba}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{ab}} = 1 \tag{14.3}$$

Définissons les nouveaux vecteurs

$$\begin{aligned} |a \otimes b\rangle' &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{ab}/2} |a \otimes b\rangle \\ |b \otimes a\rangle' &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{ba}/2} |b \otimes a\rangle \end{aligned} \tag{14.4}$$

Nous avons au lieu de (14.2)

$$\begin{aligned} |b \otimes a\rangle' &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_{ba}/2} |b \otimes a\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{ba}/2} |a \otimes b\rangle \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\theta_{ab}+\theta_{ba})/2} |a \otimes b\rangle' = \pm |a \otimes b\rangle' \end{aligned}$$

4. Si l'on admet que $\theta_{ab}$ est indépendant de $a$ et $b$ : $\theta_{ab} = \theta_{ba} = \theta$, et il en découle directement $\exp(2\mathrm{i}\theta) = 1$, $\exp(\mathrm{i}\theta) = \pm 1$.

car d'après (14.3),

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\theta_{ab}+\theta_{ba})/2} = \pm 1$$

On peut donc toujours choisir les phases des vecteurs $|a \otimes b\rangle$ et $|b \otimes a\rangle$ de telle sorte que ces vecteurs soient symétriques ou antisymétriques dans la permutation $a \leftrightarrow b$

$$\bullet \text{ symétrique} \quad |a \otimes b\rangle = +|b \otimes a\rangle \tag{14.5}$$
$$\bullet \text{ antisymétrique} \quad |a \otimes b\rangle = -|b \otimes a\rangle \tag{14.6}$$

Il en résulte que les amplitudes $\langle a \otimes b|\Psi\rangle$ sont aussi, soit symétriques, soit antisymétriques

$$\bullet \text{ symétrique} \quad \langle a \otimes b|\Psi\rangle = \langle b \otimes a|\Psi\rangle \tag{14.7}$$
$$\bullet \text{ antisymétrique} \quad \langle a \otimes b|\Psi\rangle = -\langle b \otimes a|\Psi\rangle \tag{14.8}$$

Cette propriété de symétrie ou d'antisymétrie est caractéristique du couple de particules identiques considérées. Elle ne *peut pas* dépendre des états $|\Psi\rangle$ ou $|a \otimes b\rangle$. Supposons, en effet, que pour le même couple de particules on ait une amplitude symétrique si $|\Psi\rangle = |\Phi_1\rangle$ et une amplitude antisymétrique si $|\Psi\rangle = |\Phi_2\rangle$

$$\begin{aligned}\langle a \otimes b|\Phi_1\rangle &= \langle b \otimes a|\Phi_1\rangle \\ \langle a \otimes b|\Phi_2\rangle &= -\langle b \otimes a|\Phi_2\rangle\end{aligned}$$

La linéarité de la mécanique quantique nous permet aussi de choisir un état combinaison linéaire de $|\Phi_1\rangle$ et de $|\Phi_2\rangle$

$$|\Psi\rangle = |\Phi_1\rangle\langle\Phi_1|\Psi\rangle + |\Phi_2\rangle\langle\Phi_2|\Psi\rangle$$

où l'on a supposé $\langle\Phi_1|\Phi_2\rangle = 0$. On aurait alors

$$\langle a \otimes b|\Psi\rangle = \langle a \otimes b|\Phi_1\rangle\langle\Phi_1|\Psi\rangle + \langle a \otimes b|\Phi_2\rangle\langle\Phi_2|\Psi\rangle$$

Cette amplitude de probabilité n'est ni symétrique, ni antisymétrique dans l'échange $a \leftrightarrow b$ et elle est physiquement inacceptable. Il est nécessaire que $\langle\Phi_1|\Psi\rangle = 0$, ou que $\langle\Phi_2|\Psi\rangle = 0$, pour *tous* les états $|\Psi\rangle$. Si $\langle\Phi_2|\Psi\rangle = 0$, les transitions $\Psi \to \Phi_2$ sont interdites et $|\Phi_2\rangle$ n'appartient pas à l'espace des états à deux particules. Il existe seulement deux possibilités pour le comportement dans l'échange de deux états, $a \leftrightarrow b$, correspondant à deux types d'amplitudes :

- les amplitudes symétriques (14.7) : les particules sont alors appelées des *bosons* ;
- les amplitudes antisymétriques (14.8) : les particules sont alors appelées des *fermions*.

Le caractère bosonique ou fermionique d'une espèce de particules est appelé sa *statistique*. Ainsi que nous allons le voir dans un instant, les électrons sont un exemple de fermions, et on dit aussi que les électrons *obéissent à la statistique de Fermi (ou Fermi-Dirac)*, tandis que les photons, qui sont des bosons, *obéissent à la statistique de Bose (ou Bose-Einstein)*.

L'opération qui consiste à échanger les numérotations est une transformation passive (§ 7.1.1). On peut aussi échanger les états $a$ et $b$ en déplaçant les particules dans l'espace, ce qui est une transformation active. Dans cette transformation active, le déplacement peut engendrer une phase non triviale pour des raisons topologiques, ainsi que nous l'avons vu dans la section 12.6. On montre (voir par exemple Comtet *et al.* [1992]) que, dans cet échange, le facteur de phase ne peut être que $\pm 1$ dans un espace à trois dimensions. Si l'on associe l'indiscernabilité à l'impossibilité de suivre les particules dans leur mouvement dans l'espace, alors il ne peut exister que des bosons ou des fermions. Cependant, à deux dimensions, des facteurs de phase différents de $\pm 1$ sont autorisés, ce qui entraîne l'existence de "statistiques fractionnaires" et de particules appelées *anyons*, qui ne sont ni des fermions, ni des bosons.

Nous avons déjà remarqué qu'il est commode de numéroter artificiellement les particules : $1, 2, \ldots$ La relation (14.7) implique alors que le vecteur d'état d'un système de deux bosons doit être symétrique dans un échange des numérotations $1 \leftrightarrow 2$

$$|a \otimes b\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big( |a_1 \otimes b_2\rangle + |a_2 \otimes b_1\rangle \Big) \tag{14.9}$$

et (14.8) que celui de deux fermions doit être antisymétrique

$$|a \otimes b\rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big( |a_1 \otimes b_2\rangle - |a_2 \otimes b_1\rangle \Big) \tag{14.10}$$

L'échange $a \leftrightarrow b$ est bien sûr équivalent à celui des numérotations $1 \leftrightarrow 2$. Si les particules n'ont pas de degrés de liberté internes (spin, etc.), l'état des particules peut être caractérisé par leur fonction d'onde $u_a(\vec{r}\,) = \langle \vec{r}\,|a\rangle$ et $u_b(\vec{r}\,) = \langle \vec{r}\,|b\rangle$, et la fonction d'onde du système est dans le cas de bosons

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | a \otimes b\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big( u_a(\vec{r}_1) u_b(\vec{r}_2) + u_a(\vec{r}_2) u_b(\vec{r}_1) \Big) \tag{14.11}$$

et dans le cas de fermions

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | a \otimes b\rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big( u_a(\vec{r}_1) u_b(\vec{r}_2) - u_a(\vec{r}_2) u_b(\vec{r}_1) \Big) \tag{14.12}$$

Nous venons d'écrire le vecteur d'état, ou la fonction d'onde, de deux particules identiques sans spin *indépendantes*. En présence d'interactions, la fonction d'onde sera une combinaison linéaire de fonctions d'onde du type (14.11) ou (14.12), mais même en l'absence d'interactions, le vecteur d'état, ou la

fonction d'onde, ne sont pas de simples produits tensoriels : l'espace des états pour un couple de particules identiques n'est pas l'intégralité de $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$, mais seulement le sous-espace formé des vecteurs symétriques dans un échange des numérotations s'il s'agit de deux bosons, et antisymétriques s'il s'agit de deux fermions. Ces deux espaces sont invariants par l'évolution temporelle, car le hamiltonien doit être invariant dans l'échange $1 \leftrightarrow 2$ : $[H, P_{12}] = 0$, où $P_{12}$ est l'opérateur de permutation des numérotations.

Le raisonnement que nous avons suivi pour deux particules et qui nous a permis de distinguer le cas symétrique et le cas antisymétrique ne se généralise pas à trois particules et plus, car l'identité des particules n'entraîne plus automatiquement la symétrie ou l'antisymétrie du vecteur d'état. Considérons le cas de trois particules identiques et appelons $P$ une permutation des indices 1, 2 et 3

$$(1,2,3) \xrightarrow{P} (P1, P2, P3)$$

par exemple, la permutation qui échange 1 et 3 (transposition)

$$(1,2,3) \xrightarrow{P_{13}} (3,2,1)$$

Ces permutations peuvent être représentées par des matrices dans un espace à six dimensions. Les 6 permutations possibles sont la permutation identité $(I)$, les 3 permutations de deux indices $P_{ij}$, ou transpositions, la permutation circulaire $P_{123}$ et son carré $P_{123}^2$. Comme ces permutations ne commutent pas toutes entre elles, par exemple $P_{12}P_{23} \neq P_{23}P_{12}$, les seuls vecteurs propres communs aux six permutations sont complètement symétriques ou complètement antisymétriques. En fait, il existe 4 sous-espaces invariants[5].

- Un espace à une dimension symétrique dans toute transposition, sous-tendu par un vecteur propre commun aux six permutations.
- Un espace à une dimension antisymétrique dans toute transposition, sous-tendu par l'autre vecteur propre commun aux six permutations.
- Deux espaces invariants à deux dimensions partiellement symétriques.

Le raisonnement suivi pour deux particules repose sur le fait que les deux sous-espaces invariants sont à une seule dimension

$$P_{12}|a \otimes b\rangle = \pm|b \otimes a\rangle$$

Au-delà de trois particules, la seule conclusion que l'on peut tirer de l'identité des particules est qu'aucun résultat physique ne doit être modifié quand on permute les numérotations des particules de l'ensemble. Considérons donc une propriété physique $A(1,2,3)$ et un opérateur unitaire $U_P$ qui représente l'action de la permutation dans l'espace de Hilbert des états

$$U_P A(1,2,3) U_P^{-1} = A(P1, P2, P3)$$

5. La construction explicite de ces quatre sous-espaces est donnée dans Ballentine [1998], chapitre 17 ou Peres [1993], chapitre 5.

L'unitarité de $U_P$ se déduit de $U_P^2 = I$. Soit $|\Psi\rangle$ le vecteur d'état des trois particules identiques. L'identité des particules implique que la valeur moyenne de $A$ vérifie

$$\langle\Psi|A(1,2,3)|\Psi\rangle = \langle\Psi|A(P1,P2,P3)|\Psi\rangle$$

Pour un système de trois particules identiques, cette égalité est vérifiée non seulement par les états complètement symétriques ou antisymétriques, mais aussi par les états partiellement symétriques[6]. Pour éliminer ces états partiellement symétriques qui ne semblent pas exister dans la nature, nous sommes conduits à énoncer un postulat supplémentaire[7] de la mécanique quantique.

*Postulat de symétrisation.* Le vecteur d'état d'un système de $N$ particules identiques est, soit symétrique dans l'échange de la numérotation deux quelconques des particules dans le cas de bosons, soit antisymétrique dans le cas de fermions.

Le postulat de symétrisation entraîne que la fonction d'onde de $N$ bosons (fermions) doit être symétrique (antisymétrique) dans l'échange de deux quelconques des numérotations de deux particules. Dans le cas des fermions, la fonction d'onde s'écrit donc comme un déterminant, appelé *déterminant de Slater*. Écrivons-le explicitement pour trois fermions identiques indépendants

$$\langle\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3|a\otimes b\otimes c\rangle_F = \frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix} u_a(\vec{r}_1) & u_a(\vec{r}_2) & u_a(\vec{r}_3) \\ u_b(\vec{r}_1) & u_b(\vec{r}_2) & u_b(\vec{r}_3) \\ u_c(\vec{r}_1) & u_c(\vec{r}_2) & u_c(\vec{r}_3) \end{vmatrix} \tag{14.13}$$

Dans ce cas, si par exemple $u_a = u_b$, la fonction d'onde s'annule. Ceci est appelé *principe de Pauli*, bien que ce “principe” découle en fait de l'antisymétrisation. On énonce souvent ce principe sous la forme : *il est impossible de mettre deux fermions ou plus dans le même état.* La signification de cet énoncé est évidente si les fermions sont indépendants. S'ils ne le sont pas, il implique que les fonctions d'onde admissibles sont des combinaisons linéaires de déterminants de Slater.

---

6. En fait, les sous-espaces invariants forment des “rayons généralisés”, et tous les vecteurs d'un tel sous-espace sont physiquement équivalents. En effet, d'après le lemme de Schur, les opérateurs invariants sous les permutations sont des multiples de l'identité dans les sous-espaces invariants, et leur valeur moyenne dans ces sous-espaces est indépendante du choix du représentant du “rayon généralisé”. En particulier, l'évolution temporelle conserve les sous-espaces invariants car le hamiltonien est invariant sous toute permutation : voir Messiah et Greenberg [1964]. En fait, s'il existait des particules identiques dont les états soient partiellement symétriques, on pourrait les transformer en bosons ou fermions en ajoutant des nombres quantiques supplémentaires, voir la note 8 et l'exercice 14.5.1 : l'adjonction de la couleur permet aux quarks d'être des fermions.

7. Toutefois, Peres [1993], chapitre 5, montre que les “parastatistiques” se heurtent à de sérieuses difficultés d'interprétation physique, ce qui justifie le postulat de symétrisation. On peut aussi invoquer l'argument topologique mentionné ci-dessus pour se restreindre au cas des fermions et des bosons.

### 14.1.2 Spin et statistique

Dans les équations (14.11) à (14.13), nous avons supposé les particules sans degré de liberté interne, et en particulier sans spin. Lorsque l'on tient compte des degrés de liberté internes, l'échange des numérotations doit se faire sur *tous* les nombres quantiques caractérisant l'état des particules. En particulier, on doit effectuer cet échange sur les degrés de liberté de spin. Il est remarquable que spin et statistique soient intimement reliés par le *théorème spin-statistique*, qui énonce que les particules de spin entier $(0, \hbar, 2\hbar, \ldots)$ sont des bosons, tandis que les particules de spin demi-entier $(\hbar/2, 3\hbar/2, \ldots)$ sont des fermions. Ainsi les photons, particules de spin 1, sont des bosons, et les électrons, neutrinos, protons et neutrons, particules de spin 1/2, sont des fermions. La preuve du théorème spin-statistique utilise la théorie quantique relativiste, ou théorie des champs quantifiés relativistes, mais elle nécessite un arsenal mathématique important et la maîtrise de concepts difficiles ; il n'est malheureusement pas possible d'en donner ici une idée intuitive, même si un début de preuve est esquissé au § 19.5.3. Il est frustrant de constater qu'il n'existe aucun argument élémentaire justifiant ce résultat fondamental, dont l'énoncé est pourtant tout à fait simple[8].

Après cet énoncé fondamental, revenons sur les vecteurs d'état (14.11) et (14.12). Comme nous venons de le voir, des bosons de spin zéro peuvent parfaitement exister (mésons $\pi$, atomes d'$^4$He, ...) et un vecteur d'état du type (14.11) représente sans problème l'état d'un système de deux bosons de spin zéro. En revanche, pour un système de deux fermions, le spin ne peut être nul et on doit en tenir compte dans l'écriture du vecteur d'état. Le cas le plus courant et le plus important en pratique est celui des fermions de spin 1/2 : électrons, protons, neutrons, ... Suivant les résultats du § 9.6.1, on peut former avec deux spins 1/2, soit un moment angulaire un, dont les trois vecteurs de base $|jm\rangle$, notés collectivement $\chi_t$, sont

$$\begin{aligned} |1,1\rangle &= |+_1 \otimes +_2\rangle \\ |1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+_1 \otimes -_2\rangle + |-_1 \otimes +_2\rangle\Big) \\ |1,-1\rangle &= |-_1 \otimes -_2\rangle \end{aligned} \tag{14.14}$$

soit un moment angulaire zéro

$$\chi_s = |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+_1 \otimes -_2\rangle - |-_1 \otimes +_2\rangle\Big) \tag{14.15}$$

Il est évident sur (14.14) et (14.15) que les trois états $\chi_t$ sont symétriques dans l'échange $1 \leftrightarrow 2$ et $\chi_s$ est antisymétrique dans ce même échange. Rappelons

8. On peut faire le rapprochement avec l'énoncé très élémentaire du théorème de Fermat et la complexité de la preuve d'A. Wiles. Pour une tentative intéressante (mais pas entièrement concluante) de donner une démonstration élémentaire du théorème spin-statistique, voir Berry et Robbins [1997]. Un résultat partiel est donné au § 19.5.3.

que ces états sont appelés respectivement triplet et singulet, d'où la notation $\chi_t$ et $\chi_s$. Les vecteurs d'état totalement antisymétriques d'un système de deux fermions sont donc, soit antisymétriques d'espace et symétriques de spin[9]

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | a \otimes b \rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big( u_a(\vec{r}_1) u_b(\vec{r}_2) - u_a(\vec{r}_2) u_b(\vec{r}_1) \Big) \chi_t \qquad (14.16)$$

soit au contraire symétriques d'espace et antisymétriques de spin

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | a \otimes b \rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big( u_a(\vec{r}_1) u_b(\vec{r}_2) + u_a(\vec{r}_2) u_b(\vec{r}_1) \Big) \chi_s \qquad (14.17)$$

Comme application, supposons les deux fermions de spin 1/2 dans un état de moment angulaire orbital $l$ dans le référentiel de leur centre de masse. La partie angulaire de la fonction d'onde de la particule relative est l'harmonique sphérique $Y_l^m(\hat{r})$, où $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ est le vecteur joignant les positions des deux fermions. L'échange des numérotations est équivalent à $\vec{r} \to -\vec{r}$, soit aussi $\hat{r} \to -\hat{r}$. Or, d'après (9.71), la parité des harmoniques sphériques est $(-1)^l$

$$Y_l^m(-\hat{r}) = (-1)^l Y_l^m(\hat{r}) \qquad (14.18)$$

Dans le référentiel de leur centre de masse, un système de deux fermions indentiques de spin 1/2 se trouvera dans un état de moment angulaire orbital $l$ pair si son état de spin est singulet, et dans un état de moment angulaire orbital $l$ impair si son état de spin est triplet. On note habituellement $S$ le spin total, $L$ le moment angulaire orbital total, $J$ le moment angulaire total et ${}^{2S+1}L_J$ l'état des deux fermions. Par exemple, un état ${}^3P_2$ correspond à $S = 1, L = 1, J = 2$ et un état ${}^1D_2$ à $S = 0, L = 2, J = 2$. Le cas de deux bosons indentiques de spin zéro est encore plus simple : seuls les états de moment angulaire orbital pair sont permis.

Les propriétés de symétrie du vecteur d'état de deux spins 1/2 se généralisent au cas de l'addition de deux spins $\vec{S}$ quelconques, pour former un spin total $\vec{F} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$, $0 \leq F \leq 2s$. La propriété de symétrie des coefficients de Clebsch-Gordan[10]

$$C^{jm}_{j_2 j_1; m_2 m_1} = (-1)^{j_1 + j_2 - j} C^{jm}_{j_1 j_2; m_1 m_2}$$

montre que les états de spin total $2F, 2F-2, \ldots$ sont symétriques dans l'échange des numérotations, tandis que les états $2F-1, 2F-3, \ldots$ sont

9. Pour des états à trois particules et plus, le vecteur d'état n'est pas en général le produit d'une fonction d'onde d'espace symétrique (ou antisymétrique) par un vecteur d'état de spin également symétrique (ou antisymétrique). Dans le cas de trois spins 1/2, l'état de spin total $S = 3/2$ est complètement symétrique, mais les deux états de spin total $S = 1/2$ sont partiellement symétriques. Si la fonction d'onde spatiale est partiellement symétrique, on peut dire d'une certaine façon que le vecteur d'état global devient complètement symétrique (ou antisymétrique) en ajoutant un nombre quantique de spin.

10. Voir par exemple Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément $B_X$.

antisymétriques dans cet échange. Comme application, montrons que ces propriétés de symétrie affectent le spectre de rotation d'une molécule diatomique homonucléaire, c'est-à-dire une molécule dont les deux noyaux sont strictement identiques, appartenant au même isotope, par exemple la molécule $^1$H-$^1$H = $H_2$, par opposition à la molécule hétéronucléaire $^1$H-$^2$H ou H-D, où un proton est remplacé par un deutéron D = $^2$H : le deutéron est un isotope de l'hydrogène, noyau atomique formé d'un proton et d'un neutron. La dynamique des noyaux est celle d'un rotateur sphérique (*cf.* § 9.3.1) dont les fonctions d'onde sont les harmoniques sphériques $Y_j^m(\hat{r})$, où $\vec{r}$ est le vecteur joignant les deux noyaux. Les niveaux de rotation, ou le spectre de rotation, sont donnés en fonction de $j$ par (9.54)

$$E_j = \frac{j(j+1)}{2I}$$

où $I$ est le moment d'inertie.

Si l'on choisit l'origine des coordonnées au milieu de la droite joignant les noyaux, le hamiltonien $H$ des électrons est invariant dans l'opération parité $\Pi$, $\vec{r} \to -\vec{r}$ : $[\Pi, H] = 0$ (*cf.* § 7.3.3). On peut donc diagonaliser simultanément $\Pi$ et $H$. Soit $|\psi_{\rm el}\rangle$, un vecteur propre de l'état électronique commun à $H$ et $\Pi$. Comme $\Pi^2 = I$, les valeurs propres de $\Pi$ sont $\pm 1$, $\Pi|\psi_{\rm el}\rangle = \pm|\psi_{\rm el}\rangle$ (*cf.* (7.52)). Dans la majorité des cas, et en particulier dans celui de la molécule d'hydrogène, l'état fondamental électronique correspond au signe $+$, ce que nous allons admettre dans la discussion qui suit. L'opération d'échange des numérotations des deux noyaux correspond à $\vec{r} \to -\vec{r}$, et dans cette opération la fonction d'onde des noyaux est multipliée par la parité de l'harmonique sphérique, $(-1)^j$. Si les deux noyaux ont un spin $s$, le moment angulaire total $F$ va de zéro à $2s$. Le vecteur d'état *total* de la molécule doit être symétrique (resp. antisymétrique) dans l'échange des numérotations des deux noyaux si ces noyaux sont des bosons (resp. fermions), et lorsque les deux noyaux sont des bosons ($s$ entier), deux cas sont possibles

- $F$ pair et $j$ pair
- $F$ impair et $j$ impair

Le résultat est identique lorsque les deux noyaux sont des fermions ($s$ demi-entier). La situation inverse prévaut bien sûr dans les rares cas où la parité de $|\psi_{\rm el}\rangle$ est négative. Dans le cas de la molécule d'hydrogène, le spin des protons est $s = 1/2$, et $F = 0$ (para-hydrogène) ou $F = 1$ (ortho-hydrogène). La valeur de $F$ fixe la parité de $j$ : $F = 1$ correspond à des valeurs de $j$ impaires, et $F = 0$ à des valeurs de $j$ paires. Il n'y a pas de restrictions sur $j$ dans le cas de la molécule H-D. En revanche, l'identité des noyaux n'affecte pas les niveaux de vibration. En effet, les noyaux n'échangent pas leur position comme dans une rotation : ils sont identiques, mais pas indiscernables. Une autre conséquence importante de la statistique est l'apparition de *forces d'échange*, qui sont en particulier responsables du magnétisme. Le magnétisme correspond à l'alignement d'un nombre macroscopique de spins électroniques dans une même direction, et cet

alignement construit un moment magnétique macroscopique. Si l'alignement est produit par un champ magnétique externe et disparaît en l'absence de ce champ, on a affaire à un matériau *paramagnétique.* Si l'alignement persiste en l'absence de champ, on a affaire à un matériau *ferromagnétique* (fer, cobalt, nickel...). L'aimantation disparaît au-dessus d'une certaine température, appelée *température de Curie* $T_C$. Il existe un autre type de magnétisme, *l'antiferromagnétisme*, où les spins sont ordonnés, mais l'ordre est alterné, de sorte que l'aimantation est nulle. Cet ordre antiferromagnétique disparaît aussi au-dessus d'une certaine température, la *température de Néel* $T_N$. Pour obtenir un matériau ferromagnétique ou antiferromagnétique, il faut une interaction entre les spins suffisamment intense pour les aligner ou construire un ordre alterné selon le cas. En l'absence d'une telle interaction, l'agitation thermique tend à favoriser un état où l'orientation des spins est aléatoire et l'aimantation nulle. L'origine de cette interaction ne réside pas dans le couplage entre les moments magnétiques des électrons : un calcul simple d'ordre de grandeur montre que la température de Curie, qui est de l'ordre de $10^3$ K, ne dépasserait pas 1 K dans cette hypothèse. L'interaction à l'origine du magnétisme provient de la répulsion coulombienne entre électrons combinée avec l'antisymétrisation du vecteur d'état, qui a comme conséquence une compétition énergie cinétique-énergie potentielle (coulombienne). Considérons une paire d'électrons : si les électrons sont dans un état triplet de spin, leur fonction d'onde spatiale est antisymétrique, ce qui entraîne une répulsion coulombienne faible, car la fonction d'onde s'annule lorsque les deux électrons sont voisins. En revanche, l'énergie cinétique est importante, car la fonction d'onde doit varier rapidement au voisinage du point où elle s'annule. La situation inverse prévaut lorsque l'état de spin est singulet. S'il est plus intéressant de minimiser l'énergie potentielle, les deux électrons auront tendance à aligner leur spins, ce qui implique une interaction de type ferromagnétique. Si, au contraire, l'énergie cinétique l'emporte, on obtiendra une interaction de type antiferromagnétique avec un ordre alterné des spins.

Le théorème spin-statistique a pour conséquence que des noyaux de spin zéro comme $^4$He, $^{16}$O, ... sont des bosons, mais ces particules sont composées, et une question intéressante est de vérifier la cohérence avec le théorème spin-statistique, à partir de leur composition en constituants élémentaires (ou plus élémentaires). Naturellement, la question n'a de sens que si la particule reste intacte dans les réactions qu'on lui fait éventuellement subir, par exemple parce que les énergies mises en jeu ne sont pas suffisantes pour la dissocier en ses constituants. Plutôt que de raisonner en toute généralité, nous allons nous contenter d'examiner un cas particulier, celui du deutéron. Soit $|A\rangle$, le vecteur d'état du deutéron et $\langle a \otimes b|A\rangle = \langle ab|A\rangle$, l'amplitude pour trouver dans le deutéron le proton dans l'état $|a\rangle$ et le neutron dans l'état $|b\rangle$, où nous avons supprimé le produit tensoriel pour alléger les notations. Introduisons

un second deutéron $|A_2\rangle$ en supposant pour l'instant qu'un nombre quantique distingue le proton et le neutron de ce noyau de ceux du précédent. En nous inspirant de la chromodynamique quantique, imaginons que nous puissions attribuer une couleur aux protons et aux neutrons, verte pour le premier noyau et rouge pour le second. Nous aurons donc une seconde amplitude $\langle a_2'b_2'|A_2'\rangle$, le prime indiquant qu'il s'agit de neutrons et de protons rouges, tandis que l'amplitude correspondante pour le proton et le neutron verts est notée $\langle a_1b_1|A_1\rangle$. Formons l'état à deux deutérons $|A_1A_2'\rangle$. L'amplitude pour trouver le proton et le neutron verts dans les états $a_1$ et $b_1$, le proton et le neutron rouges dans les états $a_2'$ et $b_2'$ est, en utilisant les propriétés du produit tensoriel

$$\langle a_1b_1a_2'b_2'|A_1A_2'\rangle = \langle a_1b_1|A_1\rangle\langle a_2'b_2'|A_2'\rangle$$

Mais on ne peut pas peindre les protons et les neutrons en rouge ou en vert, et il nous faut revenir au cas réel, où l'amplitude est $\langle a_1b_1a_2b_2|A_1A_2\rangle$. Comme le proton et le neutron sont des fermions, cette amplitude doit être antisymétrique dans les échanges de numérotation $a_1 \leftrightarrow a_2$ et $b_1 \leftrightarrow b_2$

$$\begin{aligned}\langle a_1b_1a_2b_2|A_1A_2\rangle &= \langle a_1b_1|A_1\rangle\langle a_2b_2|A_2\rangle - \langle a_2b_1|A_1\rangle\langle a_1b_2|A_2\rangle \\ &- \langle a_1b_2|A_1\rangle\langle a_2b_1|A_2\rangle + \langle a_2b_2|A_1\rangle\langle a_1b_1|A_2\rangle\end{aligned}$$

Cette amplitude est *symétrique* dans l'échange $A_1 \leftrightarrow A_2$

$$\langle a_1b_1a_2b_2|A_1A_2\rangle = \langle a_1b_1a_2b_2|A_2A_1\rangle \tag{14.19}$$

et le deutéron est donc un boson. De façon générale, une particule composée d'un nombre pair de fermions est un boson, et c'est un fermion si ce nombre est impair. Ainsi le proton, formé de trois quarks de spin 1/2, est un fermion, tandis que le méson $\pi$, formé d'un quark et d'un antiquark, est un boson. L'atome d'$^4$He, formé de deux protons, deux neutrons et deux électrons, est un boson, alors que son isotope, l'atome d'$^3$He, formé de deux protons, un neutron et deux électrons, est un fermion, ce qui a pour conséquence un comportement totalement différent de ces deux isotopes à basse température. On remarque que ces résultats sont compatibles avec le théorème spin-statistique, puisque qu'avec un nombre impair de particules de spin demi-entier, on ne peut former qu'une particule de spin demi-entier, un fermion, tandis qu'avec un nombre pair de particules de spin demi-entier, on ne peut former qu'une particule de spin entier, un boson.

## 14.2 Diffusion de particules identiques

Revenons à la figure 14.1 que l'on peut interpréter comme décrivant la diffusion $^{16}$O-$^{18}$O dans le référentiel du centre de masse. Nous supposons la dégénérescence du niveau fondamental levée par un champ magnétique : les atomes sont dans le niveau Zeeman le plus bas (*cf.* § 15.2.3). Soit $f(\theta)$

l'amplitude de diffusion d'un angle $\theta$ de la figure 14.1a : les deux atomes d'oxygène sont déviés d'un angle $\theta$. L'amplitude de diffusion de la figure 14.1b est alors $f(\pi - \theta)$ : les deux atomes d'oxygène sont déviés d'un angle $\pi - \theta$. Supposons, ce qui est le cas le plus plausible, que les détecteurs $D_1$ et $D_2$ ne fassent pas la distinction entre les deux isotopes. Le taux de comptage du détecteur $D_1$ (et aussi celui de $D_2$) sera alors proportionnel à

$$\mathsf{p}(\theta) = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 \tag{14.20}$$

Ce résultat donne aussi la section efficace différentielle (14.20) $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$. Dans (14.20), nous avons additionné les *probabilités*, car les états finaux [$^{16}$O dans $D_1$, $^{18}$O dans $D_2$] et [$^{16}$O dans $D_2$, $^{18}$O dans $D_1$] sont des états finaux *différents* en principe, même si en pratique les détecteurs sont incapables de faire la différence. Dans le calcul de la section efficace totale, il faut prendre garde à ne pas faire de double comptage en multipliant (13.2) par un facteur 1/2 (ou, de façon équivalente, en restreignant l'intervalle d'intégration sur $\theta$ à $0 \le \theta \le \pi/2$)

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}\Omega \left( |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 \right) \tag{14.21}$$

Passons maintenant au cas de la diffusion $^{16}$O-$^{16}$O. Bien que les interactions de physique atomique entre les deux isotopes soient strictement identiques, les résultats sont totalement différents. En effet, les processus de la figure 14.1a et 14.1b ne peuvent plus être distingués, *même en principe*, et il faut donc ajouter les *amplitudes*. L'amplitude de diffusion $f(\theta)$ est définie en attribuant formellement des numéros aux deux particules, les particules 1 et 2 étant déviées de l'angle $\theta$. L'échange des deux atomes correspond à $\theta \leftrightarrow \pi - \theta$. L'amplitude totale s'obtient en additionnant $f(\theta)$ et $f(\pi - \theta)$, le signe + étant imposé par la symétrie dans l'échange $\theta \leftrightarrow \pi - \theta$. Au lieu de (14.20), la probabilité de déclencher $D_1$ est

$$\mathsf{p}(\theta) = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \tag{14.22}$$

et la section efficace totale vaut

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}\Omega |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 = \int_0^{\pi/2} \sin\theta \,\mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \tag{14.23}$$

L'addition d'amplitudes suggère que la section efficace différentielle pourra exhiber des interférences, et c'est ce qui est effectivement observé dans de nombreux exemples. On remarque que, compte tenu de la parité des polynômes de Legendre $P_l(-u) = (-1)^l P_l(u)$, seules les valeurs de $l$ paires interviennent dans la décomposition en ondes partielle de

$$f_{\text{tot}}(\theta) = f(\theta) + f(\pi - \theta) \qquad f_{\text{tot}}(\theta) = f_{\text{tot}}(\pi - \theta)$$

L'exemple ci-dessus est celui la diffusion de deux bosons de spin zéro. La discussion est un peu plus complexe lorsque les particules ont un spin.

Limitons-nous à la diffusion de deux fermions identiques de spin 1/2, par exemple deux neutrons. Dans ce cas, on peut définir comme au § 13.2.4 une amplitude de diffusion $\hat{f}(\theta)$ qui est une matrice $4 \times 4$ dans l'espace produit tensoriel des deux spins. Si $\mathcal{P}_t$ et $\mathcal{P}_s$ sont les projecteurs sur les états triplet et singulet, et si la diffusion ne change pas le spin total, on pourra écrire

$$\hat{f}(\theta) = \big[f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)\big]\mathcal{P}_s + \big[f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta)\big]\mathcal{P}_t \tag{14.24}$$

ce qui assure l'antisymétrie espace+spin de l'amplitude. Si l'on développe suivant (13.16) $[f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)]$ et $[f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta)]$ en ondes partielles, la diffusion aura lieu dans les ondes $l = 0, 2, \ldots$ (ou ondes $s$, $d$, ...) pour des neutrons dans l'état singulet, et dans dans les ondes $l = 1, 3, \ldots$ (ou ondes $p$, $f$, ...) pour des neutrons dans l'état triplet. La section efficace s'obtient comme au § 13.2.4. Si la polarisation initiale de l'ensemble des deux neutrons est notée $\alpha$ et la polarisation finale $\beta$, la section efficace différentielle sera

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\beta\alpha}}{\mathrm{d}\Omega} = |\langle\beta|\hat{f}(\theta)|\alpha\rangle|^2 \tag{14.25}$$

Si on ne mesure pas la polarisation des neutrons finaux, on doit sommer sur $\beta$ et si l'état initial est une superposition incohérente d'états de polarisation $|\alpha\rangle$ avec une probabilité $\mathsf{p}_\alpha$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} &= \sum_\alpha \mathsf{p}_\alpha \sum_\beta \langle\alpha|\hat{f}^\dagger|\beta\rangle\langle\beta|\hat{f}|\alpha\rangle \\ &= \sum_\alpha \mathsf{p}_\alpha \langle\alpha|\hat{f}^\dagger\hat{f}|\alpha\rangle = \mathrm{Tr}\big(\rho_{\mathrm{in}}\hat{f}^\dagger\hat{f}\big)\end{aligned} \tag{14.26}$$

où $\rho_{\mathrm{in}}$ est l'opérateur statistique initial des états de spin

$$\rho_{\mathrm{in}} = \sum_\alpha \mathsf{p}_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|$$

Lorsque les neutrons initiaux ne sont pas polarisés, $\rho_{\mathrm{in}} = I/4$ et

$$\begin{aligned}\left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\mathrm{non\ pol}} &= \frac{1}{4}\mathrm{Tr}\big(\hat{f}^\dagger\hat{f}\big) = \frac{1}{4}\mathrm{Tr}\Big[\big(f_s^{\mathrm{tot}*}\mathcal{P}_s + f_t^{\mathrm{tot}*}\mathcal{P}_t\big)\big(f_s^{\mathrm{tot}}\mathcal{P}_s + f_t^{\mathrm{tot}}\mathcal{P}_t\big)\Big] \\ &= \frac{1}{4}\mathrm{Tr}\Big[|f_s^{\mathrm{tot}}|^2\mathcal{P}_s + |f_t^{\mathrm{tot}}|^2\mathcal{P}_t\Big] = \frac{1}{4}\,|f_s^{\mathrm{tot}}|^2 + \frac{3}{4}\,|f_t^{\mathrm{tot}}|^2 \\ &= \frac{1}{4}|f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4}\,|f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta)|^2\end{aligned} \tag{14.27}$$

Les poids 1/4 et 3/4 sont, bien sûr, reliés au fait qu'il y a un seul état singulet et trois états triplets. La section efficace totale s'obtient par (14.23). Lorsque la diffusion est indépendante du spin, $f_s = f_t = f$, ce qui est le cas de la diffusion coulombienne de deux particules chargées, par exemple deux électrons (exercice 13.5.4)

$$\left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\mathrm{non\ pol}} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)]$$

et le terme d'interférences est réduit d'un facteur deux par rapport à ce que l'on obtiendrait dans le cas (interdit par le théorème spin-statistique !) de la diffusion de deux fermions de spin zéro.

## 14.3 États collectifs de fermions

### 14.3.1 Le gaz de Fermi à température nulle

La statistique a une influence déterminante sur le comportement d'un système de $N$ particules identiques, $N \gg 1$, que l'on peut appeler le comportement collectif d'un tel système. Commençons par les fermions, en examinant le cas de $N$ fermions sans interactions. On peut, par exemple, supposer que ces $N$ fermions indépendants se trouvent dans un puits de potentiel dont les niveaux d'énergie $\varepsilon_\alpha$ pour une particule individuelle sont étiquetés par un indice $\alpha$. L'indice $\alpha$ représente la *totalité* des nombres quantiques nécessaires pour spécifier l'état $\alpha$ : impulsion, spin... Il peut parfaitement arriver, et c'est même le cas général, que plusieurs niveaux $\varepsilon_\alpha$ correspondent à la même valeur de l'énergie : autrement dit, les niveaux d'énergie du hamiltonien d'une particule dans le puits de potentiel sont dégénérés. Essayons de construire le niveau d'énergie fondamental de l'ensemble des $N$ fermions. Comme on peut mettre au maximum un fermion dans un état $\varepsilon_\alpha$, l'état de plus basse énergie est obtenu en remplissant les niveaux un à un à partir du niveau le plus bas, jusqu'au moment où les $N$ fermions ont trouvé leur place dans un niveau (figure 14.2). L'état de plus grande énergie $\varepsilon_{\alpha,\max}$ que l'on a dû utiliser pour placer tous les fermions est appelé *niveau de Fermi* et noté $\varepsilon_F$[11]. Prenons comme puits de potentiel une boîte cubique de volume $\mathcal{V}$ : un ensemble de fermions dans une boîte est appelé *gaz de Fermi*. L'état quantique d'un fermion est alors spécifié par la donnée de son impulsion $\vec{p}$ et de la composante $m_z$ de son spin : $\alpha = \{\vec{p}, m_z\}$. En l'absence de champ extérieur, l'énergie est purement cinétique, $\varepsilon = \vec{p}^{\,2}/(2m)$ et indépendante de $m_z$. À chaque valeur de $\vec{p}$ correspondent $2s+1$ états de même énergie et la somme sur $\alpha$ devient d'après (8.134)

$$\sum_\alpha = \sum_{\vec{p}, m_z} = (2s+1)\sum_{\vec{p}} \to \frac{(2s+1)\mathcal{V}}{h^3}\int \mathrm{d}^3p \tag{14.28}$$

À l'énergie de Fermi $\varepsilon_F$ correspond une *impulsion de Fermi* $p_F$

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} \text{ ou en général } \varepsilon_F = \sqrt{p_F^2c^2 + m^2c^4} - mc^2 \tag{14.29}$$

11. Du point de vue de la thermodynamique, le système de fermions que nous considérons est un système à température nulle $T = 0$. Le niveau de Fermi est aussi le potentiel chimique, puisqu'à température nulle le potentiel chimique est l'énergie nécessaire pour ajouter une particule. À température non nulle, la probabilité d'occupation des niveaux au-dessus du niveau de Fermi est différente de zéro, et le potentiel chimique ne coïncide plus avec le niveau de Fermi.

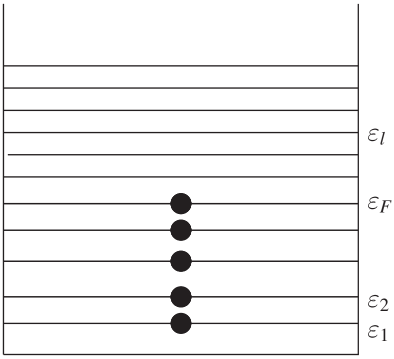



FIG. 14.2 – Remplissage des niveaux du gaz de Fermi.

souvent appelée *moment de Fermi*. Comme l'énergie est une fonction croissante de $p$, tous les états $\{\vec{p}, m_z\}$ tels que $p \leq p_F$ auront un nombre d'occupation égal à un. Il est maintenant immédiat de calculer l'impulsion de Fermi

$$N = \frac{(2s+1)\mathcal{V}}{h^3} \int_{p \leq p_F} \mathrm{d}^3 p = \frac{(2s+1)\mathcal{V}}{h^3} \frac{4\pi}{3} p_F^3 \tag{14.30}$$

Si $n = N/\mathcal{V}$ est la densité de fermions, le moment de Fermi vaut

$$p_F = \left[\frac{6\pi^2}{2s+1}\right]^{1/3} \hbar n^{1/3} \tag{14.31}$$

Cette équation est valable aussi bien dans le régime non relativiste que relativiste. La sphère de rayon $p_F$ est appelée *sphère de Fermi* et sa surface la *surface de Fermi*. Ces notions se généralisent au cas de la physique du solide, où l'on n'a plus la symétrie sphérique, mais une symétrie déterminée par le réseau cristallin : la surface de Fermi, qui acquiert alors une forme plus compliquée que celle d'une sphère, est un objet fondamental dans l'étude des propriétés électromagnétiques des métaux. On déduit de (14.31) l'énergie de Fermi dans le cas non relativiste où $\varepsilon = p^2/(2m)$

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = \left[\frac{6\pi^2}{2s+1}\right]^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} n^{2/3} \tag{14.32}$$

La cas usuel est $s = 1/2$. L'énergie de Fermi est l'énergie caractéristique d'un système de $N$ fermions dans une boîte de volume $\mathcal{V}$.

Il est instructif de donner un ordre de grandeur dans le cas particulier le plus important de gaz de Fermi, celui des électrons de conduction dans un métal. Prenons l'exemple du cuivre, dont la masse volumique est $8.9\,\mathrm{g.cm^{-3}}$ et la masse atomique 63.5, ce qui correspond à une densité $n$ de $8.4 \times 10^{28}$ atomes par $\mathrm{m}^3$. Le cuivre ayant un électron de conduction par atome, ce chiffre

donne aussi la densité d'électrons ; reportant cette valeur dans (14.32) avec $s = 1/2$, on trouve pour le niveau de Fermi $\varepsilon_F \simeq 7.0\,\text{eV}$. Ceci est un ordre de grandeur typique pour les électrons de conduction dans un métal : l'énergie de Fermi est de quelques eV.

Calculons maintenant l'énergie du gaz de Fermi. D'après (14.28) avec $s = 1/2$, on trouve pour l'énergie du gaz

$$E = \frac{\mathcal{V}}{\pi^2\hbar^2}\int_0^{p_F} p^2 \mathrm{d}p \left(\frac{p^2}{2m}\right) = \frac{3}{5}\,N\varepsilon_F \tag{14.33}$$

où nous avons utilisé l'expression (14.30) de $p_F$ en fonction de $N$ dans le cas $s = 1/2$. Une autre expression intéressante est celle de l'énergie par particule $E/N$

$$\frac{E}{N} = (3\pi^2)^{2/3}\frac{3\hbar^2}{10m}n^{2/3} \tag{14.34}$$

L'énergie cinétique moyenne d'une particule augmente comme $n^{2/3}$. Dans le cas d'un gaz d'électrons, l'énergie potentielle moyenne est de l'ordre de $e^2/d$, où $d \propto n^{-1/3}$ est la distance moyenne entre deux électrons. L'énergie potentielle moyenne par particule est donc $\propto n^{1/3}$, et plus un gaz de Fermi est dense, plus l'énergie cinétique $\propto n^{2/3}$ l'emporte sur l'énergie potentielle. Ce résultat est à l'opposé de celui d'un gaz classique, et contrairement à un gaz classique, *un gaz de Fermi est d'autant plus proche d'un gaz parfait que sa densité est grande !*

On peut donner une image intuitive du gaz de Fermi, en remarquant que la dispersion $\Delta p$ sur l'impulsion est de l'ordre de $p_F$, tandis que l'ordre de grandeur de la dispersion sur la position est $\mathcal{V}^{1/3}$. On tire donc de (14.31)

$$\Delta p\,\Delta x \sim \hbar N^{1/3} \tag{14.35}$$

En raison du principe de Pauli, le $\hbar$ de l'inégalité de Heisenberg est transformé en $\hbar N^{1/3}$ : le volume occupé dans l'espace de phase est plus grand que pour des particules non identiques.

### 14.3.2 Opérateurs de création et d'annihilation

Les manipulations de fonctions d'onde à $N$ particules sont très fastidieuses, et pour cette raison, on préfère utiliser un formalisme opératoriel ou formalisme du *champ de Schrödinger*, souvent improprement appelé formalisme de la “seconde quantification” : une expression qui devrait être bannie. Dans cette section, nous allons établir ce formalisme dans le cas des fermions[12], et

12. Afin de simplifier les notations, nous supposons que les fermions sont polarisés, de façon à pouvoir négliger les degrés de liberté de spin. Il est aussi possible de considérer des fermions de spin zéro, ce qui serait évidemment absurde dans une théorie invariante de Lorentz. En revanche, une théorie invariante de Galilée s'accommode parfaitement de fermions de spin zéro.

nous le transposerons dans la section suivante au cas des bosons. Soit $P$ une permutation arbitraire de $(1, \ldots, N)$

$$(1, \ldots, N) \xrightarrow{P} (P1, \ldots, PN) \tag{14.36}$$

Cette permutation est représentée dans l'espace de Hilbert à $N$ fermions $\mathcal{H}^{(N)}$ par un opérateur unitaire $U_P$

$$[U_P \Phi](\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \Phi(\vec{r}_{P1}, \ldots, \vec{r}_{PN}) \tag{14.37}$$

Si $\delta_P$ est la signature de la permutation $P$, nous devons avoir d'après le postulat d'antisymétrisation pour les fermions

$$[U_P \Phi](\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \delta_P \Phi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \tag{14.38}$$

Soit $\{u_\alpha(\vec{r}\,) = \langle \vec{r}\,|\alpha\rangle\}$ un ensemble de fonctions d'onde orthonormées à une particule[13]

$$\int \mathrm{d}^3 r \, u_\alpha^*(\vec{r}\,) u_\beta(\vec{r}\,) = \delta_{\alpha\beta} \tag{14.39}$$

formant une base de l'espace des états à un fermion (relation de fermeture)

$$\sum_\alpha u_\alpha(\vec{r}\,) u_\alpha^*(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,') \tag{14.40}$$

Une base des états à $N$ fermions peut être construite à l'aide des fonctions d'onde normalisées

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha_1 \ldots \alpha_N}(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \delta_P \, u_{\alpha_1}(\vec{r}_{P1}), \ldots u_{\alpha_N}(\vec{r}_{PN}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{\alpha_1}(\vec{r}_1) & \cdots & u_{\alpha_1}(\vec{r}_N) \\ u_{\alpha_2}(\vec{r}_1) & \cdots & u_{\alpha_2}(\vec{r}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ u_{\alpha_N}(\vec{r}_1) & \cdots & u_{\alpha_N}(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \end{aligned} \tag{14.41}$$

L'idée de départ du formalisme opératoriel est de construire une base de l'espace de Hilbert pour $N$ fermions en se donnant pour $N$ fermions *indépendants* les *nombres d'occupation* $n_\alpha$ de chaque état $|\alpha\rangle$. En raison du principe de Pauli, le nombre $n_\alpha$ ne peut valoir que $n_\alpha = 0$ : état $|\alpha\rangle$ non occupé, ou $n_\alpha = 1$ : état $|\alpha\rangle$ occupé. Comme $n_\alpha = 0$ ou 1, $n_\alpha$ vérifie $n_\alpha^2 = n_\alpha$, et de plus $\sum_\alpha n_\alpha = N$ et

13. Si $H^{(1)}$ est le hamiltonien pour un seul fermion, on peut par exemple prendre comme fonctions $u_\alpha(\vec{r}\,)$ les fonctions propres d'un hamiltonien à une particule

$$H^{(1)} u_\alpha(\vec{r}\,) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}\,) \right) u_\alpha(\vec{r}\,) = \varepsilon_\alpha u_\alpha(\vec{r}\,)$$

$E = \sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha$ (voir la note 13). On pourra faire correspondre à un ensemble de nombres d'occupation $\{n_{\alpha_i}\}$ d'états individuels $|\alpha_i\rangle$, un état à $N$ fermions

$$|\Phi_{n_{\alpha_1},n_{\alpha_i}}\rangle \equiv |n_{\alpha_1}, \ldots, n_{\alpha_i}, \ldots\rangle \qquad \sum_{i=1}^{\infty} n_{\alpha_i} = N \tag{14.42}$$

Les états (14.42) sont appelés *états de Fock*, et ils forment une base orthonormée de l'espace de Hilbert des états à $N$ fermions. Dans l'état (14.41), $n_{\alpha_i} = 1$ pour $1 \leq i \leq N$ et $n_{\alpha_i} = 0$ pour $i > N$. Une fonction d'onde à $N$ fermions du type (14.41) s'écrit en général

$$\Phi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N | n_{\alpha_1}, \ldots, n_{\alpha_i}, \ldots\rangle \tag{14.43}$$

Afin d'alléger les notations, posons $n_{\alpha_i} = n_i$. Nous allons définir l'opérateur d'annihilation $c_i$ par son action sur un état de nombres d'occupation $n_1, \ldots, n_i, \ldots$

$$c_i|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle = (-1)^{\eta_i}|n_1, \ldots, n_i - 1, \ldots\rangle \tag{14.44}$$

$c_i$ détruit un fermion dans l'état $i$. Le facteur $(-1)^{\eta_i}$ est choisi de façon à assurer l'antisymétrie dans l'échange de deux fermions, et pour définir $\eta_i$ , il faut ordonner les nombres quantiques $i$. Cet ordre est arbitraire, mais il est fixé une fois pour toutes. Le nombre $\eta_i$ est alors donné par

$$\eta_i = \sum_{k=1}^{i-1} n_k \tag{14.45}$$

Déterminons l'adjoint $c_i^\dagger$ de $c_i$ à l'aide de la définition de l'opérateur adjoint

$$\begin{aligned}\langle n_1', \ldots, n_i', \ldots | c_i | n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle &= (-1)^{\eta_i} n_i \delta_{n_1' n_1} \ldots \delta_{n_i', n_i - 1} \ldots \\ &= \langle n_1, \ldots, n_i, \ldots | c_i^\dagger | n_1', \ldots, n_i', \ldots\rangle^*\end{aligned}$$

Cette équation sera vérifiée si l'action de $c_i^\dagger$ est donnée par

$$c_i^\dagger|n_1', \ldots, n_i', \ldots\rangle = (-1)^{\eta_i'}(1 - n_i')|n_1', \ldots, n_i' + 1, \ldots\rangle \tag{14.46}$$

L'équation (14.46) montre que $c_i^\dagger$ crée un fermion dans l'état $i$, pourvu que $n_i' = 0$ ; si $n_i' = 1$, le résultat est zéro, ce qui rend compte du principe de Pauli selon lequel on ne peut pas mettre plus d'un fermion dans le même état. Les opérateurs $c_i$ et $c_i^\dagger$ obéissent à des *relations d'anticommutation canoniques* (RAC). En effet, d'après (14.44) et (14.46)

$$\begin{aligned}c_i c_i^\dagger|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle &= (-1)^{2\eta_i}(1 - n_i)(1 + n_i)|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle \\ &= (1 - n_i)|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle \\ c_i^\dagger c_i|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle &= (-1)^{2\eta_i}(2 - n_i)n_i|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle \\ &= n_i|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle\end{aligned}$$

L'*anticommmutateur*

$$\{c_i, c_i^\dagger\} := c_i c_i^\dagger + c_i^\dagger c_i \tag{14.47}$$

est donc un multiple de l'identité

$$\{c_i, c_i^\dagger\} = I$$

Le facteur $(-1)^{\eta_i}$, qui assure l'antisymétrie du vecteur d'état, conduit à des relations d'anticommutation pour les opérateurs $c_i$ et $c_j$ ainsi que pour $c_i^\dagger$ et$c_j^\dagger$ pour $i \neq j$. On montre (exercice 14.5.6) que les relations d'anticommutation complètes sont

$$\boxed{\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}\, I \qquad \{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0} \tag{14.48}$$

L'opérateur $\mathsf{N}_i$ nombre de fermions dans l'état $i$ est

$$\mathsf{N}_i = c_i^\dagger c_i \qquad \mathsf{N}_i|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle = n_i|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle \tag{14.49}$$

et l'opérateur nombre total de fermions

$$\mathsf{N} = \sum_{i=1}^{\infty} c_i^\dagger c_i \tag{14.50}$$

En effet, $\mathsf{N}$ compte le nombre total de fermions

$$\mathsf{N}|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \left(\sum_{i=1}^{\infty} n_i\right)|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle \tag{14.51}$$

Les opérateurs $c_i$ et $c_i^\dagger$ changent le nombre de fermions d'une unité, et ils n'agissent pas dans $\mathcal{H}^{(N)}$ mais dans l'espace $\mathcal{H}_{\mathrm{F}}$ somme directe des $\mathcal{H}^{(N)}$, appelé espace de Fock

$$\mathcal{H}_{\mathrm{F}} = \mathcal{H}^{(0)} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}^{(N)} \oplus \cdots \tag{14.52}$$

L'espace à zéro particule $\mathcal{H}^{(0)}$, ou état du vide $|0\rangle$, est annihilé par tous les $c_i$ :

$$c_i|0\rangle = 0 \quad \forall i \tag{14.53}$$

### 14.3.3 Opérateurs de champ et hamiltonien

À partir des opérateurs $c_i$ et $c_i^\dagger$ et d'un ensemble complet de fonctions d'onde à une particule $\{u_i(\vec{r}, t)\}$, on construit les *opérateurs de champ* $\psi(\vec{r}, t)$et $\psi^\dagger(\vec{r}, t)$ agissant dans $\mathcal{H}_{\mathrm{F}}$

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i\, u_i(\vec{r}, t) \\ \psi^\dagger(\vec{r}, t) &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i^\dagger\, u_i^*(\vec{r}, t) \end{aligned} \tag{14.54}$$

Dans (14.54), les champs sont écrits dans le point de vue de Heisenberg ; les champs dans le point de vue de Schrödinger sont donnés par $\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}, t = 0)$. On montre (exercice 14.5.6) que les opérateurs $\psi$ et $\psi^\dagger$ sont indépendants du choix de la base $\{u_i\}$. Ils vérifient les RAC *à temps égaux*

$$\begin{aligned} \{\psi(\vec{r}, t), \psi(\vec{r}\,', t)\} = \{\psi^\dagger(\vec{r}, t), \psi^\dagger(\vec{r}\,', t)\} = 0 \\ \{\psi(\vec{r}, t), \psi^\dagger(\vec{r}\,', t)\} = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')I \end{aligned} \tag{14.55}$$

La dernière relation se déduit de la relation de fermeture (14.40).

La relation d'orthogonalité (14.39) permet, quant à elle, de mettre l'opérateur nombre de particules sous la forme

$$\mathsf{N} = \int \mathrm{d}^3 r\, \psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r}) \tag{14.56}$$

On en déduit les relations de commutation de $\mathsf{N}$ avec $\psi^\dagger$ et $\psi$ en utilisant

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\} \tag{14.57}$$

On obtient les deux relations de commutation qui sont conjuguées hermitiennes

$$[\mathsf{N}, \psi(\vec{r})] = -\psi(\vec{r}) \qquad [\mathsf{N}, \psi^\dagger(\vec{r})] = \psi^\dagger(\vec{r}) \tag{14.58}$$

L'interprétation physique de (14.58) est claire : $\psi$ ($\psi^\dagger$) diminue (augmente) le nombre de fermions d'une unité. Notre objectif est maintenant d'écrire dans le point de vue de Schrödinger l'expression dans l'espace de Fock du hamiltonien $H$ en fonction des opérateurs de champ. Une étape intermédiaire consiste à montrer une importante identité pour la fonction d'onde à $N$ fermions. Soit $|\Phi_N\rangle$, un état à $N$ fermions, vecteur propre de $\mathsf{N}$

$$\mathsf{N}|\Phi_N\rangle = N|\Phi_N\rangle \tag{14.59}$$

Nous nous proposons de montrer que la fonction d'onde correctement normalisée

$$\Phi_N(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)|\Phi_N\rangle$$

peut se mettre sous la forme

$$\boxed{\Phi_N(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\psi(\vec{r}_1)\ldots\psi(\vec{r}_N)|\Phi_N\rangle} \tag{14.60}$$

ce que l'on peut aussi écrire

$$|\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\,\psi^\dagger(\vec{r}_N)\ldots\psi^\dagger(\vec{r}_1)|0\rangle \tag{14.61}$$

L'opérateur $\psi^\dagger(\vec{r})$ appliqué au vide crée un état propre de la position. Pour comprendre l'origine de l'équation (14.60), on remarque tout d'abord que

$\Phi_N$ est manifestement antisymétrique dans l'échange $\vec{r}_i \leftrightarrow \vec{r}_j$, en raison des RAC (14.55). Une deuxième observation est que (avec $\vec{r}_i \to i$) le produit $\psi(1)\cdots\psi(N)$ détruit $N$ fermions, et par conséquent

$$\psi(1)\cdots\psi(N)|\Phi_N\rangle \propto |0\rangle$$

Évaluons la normalisation de $\Phi_N$

$$\begin{aligned}\mathcal{N} &= \frac{1}{N!}\int \mathrm{d}^3r_1\cdots\mathrm{d}^3r_N \sum_n \langle\Phi_N|\psi^\dagger(N)\cdots\psi^\dagger(1)\cdots|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi(1)\cdots \\ &\quad \times\, \psi(N)|\Phi_N\rangle \\ &= \frac{1}{N!}\int \mathrm{d}^3r_2\cdots\mathrm{d}^3r_N\, \langle\Phi_N|\psi^\dagger(N)\cdots\psi^\dagger(2)\mathsf{N}\,\psi(2)\cdots\psi(N)|\Phi_N\rangle\end{aligned}$$

où nous avons utilisé l'expression (14.56) de $\mathsf{N}$ et le fait qu'une somme $\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = I$ sur un système complet d'états propres de $\mathcal{H}_\mathrm{F}$ peut être remplacée par le projecteur sur le vide $|0\rangle\langle 0|$. Nous remarquons ensuite que

$$\int \mathrm{d}^3r_2\,\psi^\dagger(2)\mathsf{N}\,\psi(2) = \int \mathrm{d}^3r_2\,\psi^\dagger(2)\psi(2)(\mathsf{N}-1) = \mathsf{N}(\mathsf{N}-1)$$

et par récurrence

$$\mathcal{N} = \frac{1}{N!}\langle\Phi_N|\mathsf{N}(\mathsf{N}-1)\cdots(\mathsf{N}-N+1)|\Phi_N\rangle = 1$$

ce qui montre que $\Phi_N$ est normalisée à l'unité. Comme cas particulier, nous pouvons écrire le déterminant de Slater (14.41) comme

$$\Phi_{\alpha_1\ldots\alpha_N}(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\psi(\vec{r}_N)\ldots\psi(\vec{r}_1)|n_{\alpha_1},\ldots,n_{\alpha_N}\rangle \tag{14.62}$$

avec $n_{\alpha_i} = 1, 1 \leq i \leq N$, et l'ordre des opérateurs de champ assure que le signe global est correct (exercice 14.5.6). La supériorité du formalisme opératoriel est manifeste : (14.62) comprend un seul terme, au lieu des $N!$ termes du déterminant de Slater (14.41).

Venons-en maintenant au hamiltonien. Nous supposons que les fermions de masse $m$ sont soumis à un potentiel externe $U(\vec{r})$ et qu'ils interagissent deux à deux *via* un potentiel $W(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$. Nous allons montrer que l'expression du hamiltonien est

$$\boxed{\begin{aligned}H &= \int \mathrm{d}^3r\,\psi^\dagger(\vec{r})\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi(\vec{r}) + \int \mathrm{d}^3r\,\psi^\dagger(\vec{r})U(\vec{r})\psi(\vec{r}) \\ &\quad + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3r_1\,\mathrm{d}^3r_2\,\psi^\dagger(\vec{r}_1)\psi^\dagger(\vec{r}_2)W(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\psi(\vec{r}_2)\psi(\vec{r}_1)\end{aligned}} \tag{14.63}$$

On remarquera l'ordre des deux derniers termes dans la seconde ligne de (14.63), qui est crucial pour que le signe de cette ligne soit correct. Le hamiltonien se décompose en énergie cinétique $\mathcal{K}$, énergie potentielle à un corps $\mathcal{U}$ et énergie potentielle à deux corps $\mathcal{W}$

$$H = \mathcal{K} + \mathcal{U} + \mathcal{W} \tag{14.64}$$

Il est immédiat de montrer que les opérateurs nombre de particules $\mathsf{N}$ (14.50) et $H$ commutent : $[\mathsf{N}, H] = 0$, car chacun des termes de $H$ contient autant d'opérateurs de création que d'opérateurs d'annihilation. Le hamiltonien (14.63) *ne change pas le nombre de particules.* Il existe donc une base de $\mathcal{H}^{(N)}$ formée de vecteurs propres $|\Phi_{EN}\rangle$ communs à $H$ et à $\mathsf{N}$.

$$H|\Phi_{EN}\rangle = E|\Phi_{EN}\rangle \qquad \mathsf{N}|\Phi_{EN}\rangle = N|\Phi_{EN}\rangle \tag{14.65}$$

Pour justifier l'expression de $H$, examinons la quantité suivante $J$ définie par

$$J = \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\psi(1)\ldots\psi(N)H|\Phi_{EN}\rangle \tag{14.66}$$

où nous avons utilisé (14.56) et la notation allégée $\vec{r}_i \to i$. $J$ peut aussi s'écrire

$$J = \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|[\psi(1)\ldots\psi(N), H]|\Phi_{EN}\rangle$$

car $H|0\rangle = 0$. En utilisant $N$ fois la relation

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \tag{14.67}$$

nous obtenons

$$J = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{j=0}^{N}\langle 0|\psi(1)\ldots\psi(j-1)[\psi(j), H]\psi(j+1)\ldots\psi(N)|\Phi_{EN}\rangle$$

Nous devons donc calculer le commutateur $[\psi(j), H]$, ce que nous allons faire successivement pour les termes $\mathcal{K}$, $\mathcal{U}$ et $\mathcal{W}$ dans (14.64). Commençons par $\mathcal{K}$

$$[\psi(j), \mathcal{K}] = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}^3 r\,[\psi(j), \psi^\dagger(\vec{r})\nabla^2\psi(\vec{r})]$$

Utilisant à nouveau (14.57), nous obtenons

$$[\psi(j), \psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r})] = \delta(\vec{r} - \vec{r}_j)\psi(\vec{r})$$

soit

$$[\psi(j), \mathcal{K}] = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2\psi(\vec{r}_j) \tag{14.68}$$

et de même

$$[\psi(j), \mathcal{U}] = U(\vec{r}_j)\psi(\vec{r}_j) \tag{14.69}$$

Pour traiter le terme $\mathcal{W}$, nous partons de

$$[\psi(j), \psi^\dagger(1)\psi^\dagger(2)\psi(2)\psi(1)] = [\psi(j), \psi^\dagger(1)\psi^\dagger(2)]\psi(2)\psi(1)$$

et nous utilisons à nouveau (14.57) pour obtenir

$$\begin{aligned}[\psi(j), \psi^\dagger(1)\psi^\dagger(2)]\psi(2)\psi(1) &= \big(\{\psi(j), \psi^\dagger(1)\}\psi^\dagger(2) - \psi^\dagger(1)\{\psi(j), \psi^\dagger(2)\}\big) \\ &\quad\ \psi(2)\psi(1) \\ &= \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_j)\psi^\dagger(2)\psi(2)\psi(1) - \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_j)\psi^\dagger(1) \\ &\quad\ \psi(2)\psi(1)\end{aligned}$$

soit, pour le commutateur $[\psi(j), \mathcal{W}]$

$$[\psi(j), \mathcal{W}] = \int \mathrm{d}^3 r\, \psi^\dagger(\vec{r})W(\vec{r}, \vec{r}_j)\psi(\vec{r})\psi(\vec{r}_j) = X(j)\psi(\vec{r}_j) \tag{14.70}$$

Combinant les équations (14.68) à (14.70), nous déduisons le commutateur $[\psi(j), H]$

$$[\psi(j), H] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2 + U(j) + X(j)\right]\psi(j) \tag{14.71}$$

Ce résultat intermédiaire est intéressant car il donne les équations du mouvement des opérateurs de champ dans le point de vue de Heisenberg

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = [\psi(\vec{r}, t), H] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}) + X(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}, t) \tag{14.72}$$

Nous reportons ce résultat dans l'expression de $J$

$$\begin{aligned}J &= \sum_{j=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2 + U(j)\right)\Phi_{EN} \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{j=1}^{N}\langle 0|\psi(1)\ldots\psi(j-1)X(j)\psi(j+1)\ldots\psi(N)|\Phi_{EN}\rangle\end{aligned}$$

Nous pouvons enfin commuter $X(j)$ avec $\psi(1)\ldots\psi(j-1)$ en utilisant

$$[\psi(i), X(j)] = W(\vec{r}_i, \vec{r}_j)\psi(i)$$

et finalement

$$\begin{aligned}J &= \left[\sum_{j=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2 + U(\vec{r}_j)\right) + \sum_{i<j}W(\vec{r}_i, \vec{r}_j)\right]\Phi_{EN}(\vec{r}_1, \ldots \vec{r}_N) \\ &= E\Phi_{EN}(\vec{r}_1, \ldots \vec{r}_N)\end{aligned} \tag{14.73}$$

ce qui montre que $\Phi_{EN}$ est bien solution de l'équation de Schrödinger pour $N$ fermions dans un potentiel $U(\vec{r})$ interagissant entre eux *via* un potentiel à deux corps $W$ ; ceci met un point final à la justification de l'expression (14.63) du hamiltonien.

### 14.3.4 Autres formes du hamiltonien

Pour conclure cette section, nous allons donner deux autres formes utiles du hamiltonien. Examinons d'abord le terme d'énergie cinétique que nous récrivons

$$\mathcal{K} = \int \mathrm{d}^3 r \, \psi^\dagger(\vec{r}) \frac{\vec{P}^2}{2m} \psi(\vec{r}) = \int \mathrm{d}^3 r \, \psi^\dagger(\vec{r}, t) K \, \psi(\vec{r}, t)$$

où $\vec{P}$ est l'opérateur impulsion, avec

$$\vec{P}^2 u_j(\vec{r}) = -\hbar^2 \nabla^2 u_j(\vec{r}) \quad \text{ou} \quad \langle \vec{r} | \vec{P}^2 | j \rangle = -\hbar^2 \nabla^2 u_j(\vec{r})$$

Insérons les expressions (14.54) de $\psi(\vec{r})$ et $\psi^\dagger(\vec{r})$ dans l'expression de $\mathcal{K}$ qui devient

$$\mathcal{K} = \frac{1}{2m} \int \mathrm{d}^3 r \, c_i^\dagger c_j \langle i | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{P}^2 | j \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} c_i^\dagger c_j \langle i | \nabla^2 | j \rangle$$

Répétant les mêmes manipulations sur les deux autres termes, $H$ prend la forme

$$H = \sum_{ij} c_i^\dagger c_j \langle i \Big| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \Big| j \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ijlm} c_i^\dagger c_j c_m c_l \langle ij | W | lm \rangle \tag{14.74}$$

avec

$$\langle ij | W | lm \rangle = W_{ij;lm} = \int \mathrm{d}^3 r_1 \mathrm{d}^3 r_2 \, u_i^*(\vec{r}_1) u_j^*(\vec{r}_2) W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) u_l(\vec{r}_1) u_m(\vec{r}_2) \tag{14.75}$$

En général, le potentiel $W$ est invariant par translation : $W = W(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. Si de plus $U = 0$, le système de fermions est invariant par translation, et il est naturel de choisir comme fonctions d'onde $u_i$ des ondes planes, afin de mettre en évidence la conservation de l'impulsion, en quantifiant dans une boîte de volume $\mathcal{V}$

$$u_i(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i} \vec{k}_i \cdot \vec{r}} \tag{14.76}$$

Le terme d'énergie cinétique est évidemment diagonal car nous utilisons une représentation où $\vec{P}$ est diagonal, et les éléments de matrice (14.75) de $W$ sont

$$\begin{aligned} \langle ij | W(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | lm \rangle \quad = \quad & \frac{1}{\mathcal{V}^2} \int \mathrm{d}^3 r_1 \mathrm{d}^3 r_2 \, \exp\Big[ -\mathrm{i}(\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1 + \vec{k}_j \cdot \vec{r}_2 \\ & - \vec{k}_l \cdot \vec{r}_3 - \vec{k}_m \cdot \vec{r}_4) \Big] \, W(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \end{aligned}$$

Effectuons le changement de variables de jacobien unité

$$\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \qquad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \tag{14.77}$$

Comme $W$ ne dépend pas de $\vec{R}$, l'intégrale sur $\vec{R}$ donne la conservation de l'impulsion

$$\int \mathrm{d}^3R\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\vec{k}_i+\vec{k}_j-\vec{k}_l-\vec{k}_m)\cdot\vec{R}} = \mathcal{V}\,\delta_{\vec{k}_i+\vec{k}_j;\vec{k}_l+\vec{k}_m} \tag{14.78}$$

L'intégrale sur $\vec{r}$ fait apparaître la transformée de Fourier $\tilde{W}$ de $W$

$$\tilde{W}(\vec{q}\,) = \int \mathrm{d}^3r\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\,W(\vec{r}) \tag{14.79}$$

avec

$$\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_l = \vec{k}_m - \vec{k}_j \tag{14.80}$$

Il est commode d'étiqueter les quatre vecteurs d'onde de la façon suivante (figure 14.3)

$$\vec{k}_l = \vec{k} \qquad \vec{k}_m = \vec{k}\,' \qquad \vec{k}_i = \vec{k}+\vec{q} \qquad \vec{k}_j = \vec{k}\,'-\vec{q}$$

et avec ces notations, le hamiltonien devient

$$\boxed{H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2k^2}{2m} c^\dagger_{\vec{k}}\,c_{\vec{k}} + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\vec{k},\vec{k}\,',\vec{q}} \tilde{W}(\vec{q}\,)\,c^\dagger_{\vec{k}+\vec{q}}\,c^\dagger_{\vec{k}\,'-\vec{q}}\,c_{\vec{k}\,'}\,c_{\vec{k}}} \tag{14.81}$$

Le terme d'interaction se représente graphiquement sous forme d'un diagramme de Feynman (figure 14.3) : les impulsions entrantes sont $\hbar\vec{k}$ et $\hbar\vec{k}\,'$, les impulsions sortantes $\hbar(\vec{k}\,'-\vec{q}\,)$ et $\hbar(\vec{k}+\vec{q}\,)$ et le transfert d'impulsion est $\hbar\vec{q}$.

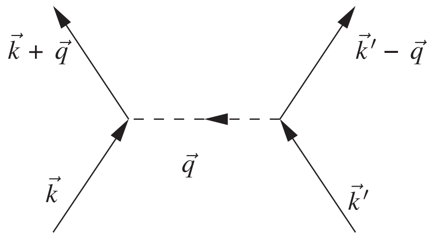



FIG. 14.3 – Diagramme de Feynman pour le terme d'interaction dans (14.81).

Comme application de (14.74), calculons la valeur moyenne de l'énergie dans l'état $|\Phi_0\rangle$ de $N$ fermions indépendants défini par les nombres d'occupation $n_i = 1$, $1 \le i \le N$, $n_i = 0$, $i > N$, correspondant par exemple à un état de $N$ fermions à température nulle (§ 14.3.1)

$$|\Phi_0\rangle = |n_1 = 1, \cdots, n_N = 1\rangle \tag{14.82}$$

Il suffit donc de tenir compte des états $1 \le i \le N$. L'action de $c_i^\dagger$ sur $|\Phi_0\rangle$ et $c_i$ sur$\langle\Phi_0|$ est évidente

$$c_i^\dagger|\Phi_0\rangle = 0 \qquad\qquad \langle\Phi_0|c_i = 0$$

et utilisant les relations d'anticommutation, nous déduisons

$$\langle\Phi_0|c_i^\dagger c_j^\dagger c_m c_l|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0|\delta_{jm}c_i^\dagger c_l - c_i^\dagger c_m c_j^\dagger c_l|\Phi_0\rangle = \delta_{jm}\delta_{il} - \delta_{im}\delta_{jl} \quad (14.83)$$

Reportant cette équation dans le calcul de la valeur moyenne de $H$ donne

$$\boxed{\langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle = \sum_{i=1}^{\infty}(K+U)_{ii}\, n_i + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}(W_{ij;ij} - W_{ij;ji})\, n_i n_j} \quad (14.84)$$

L'introduction des nombres d'occupation $n_i$ permet de sommer jusqu'à l'infini. Le terme $W_{ij;ij}$ est appelé terme direct et $W_{ij;ji}$ *terme d'échange* ; ce deuxième terme a manifestement pour origine l'antisymétrie du vecteur d'état.

Le résultat (14.84) pour la valeur moyenne de $H$ est, en fait, un résultat de premier ordre de la théorie des perturbations (§ 15.1.2). On peut obtenir un résultat plus précis en utilisant une méthode appelée *approximation de Hartree-Fock*, exercice 14.5.7. Cette approximation montre que, dans le sous-espace des états occupés $1 \le i \le N$, on peut remplacer le potentiel à un corps $U$ et le potentiel à deux corps $W$ de $H$ par un potentiel effectif à un corps $U_{\text{eff}}$ dont les éléments de matrice sont donnés par

$$[U_{\text{eff}}]_{ml} = U_{ml} + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}(W_{jm;jl} - W_{mj;jl}) \quad (14.85)$$

et à prendre comme nouvelle base dans le sous-espace $1 \le i \le N$, au lieu des fonctions d'onde $u_i(\vec{r})$, les fonctions d'onde $\tilde{u}_l(\vec{r})$ qui diagonalisent le hamiltonien effectif

$$\sum_l [K + U_{\text{eff}}]_{ml}\tilde{u}_l(\vec{r}) = \tilde{\varepsilon}_m \tilde{u}_m(\vec{r}) \quad (14.86)$$

Comme les fonctions d'onde $\tilde{u}_l(\vec{r})$ servent aussi à calculer les éléments de matrice de $W$ dans (14.85), la méthode de Hartree-Fock est appelée "autocohérente". En résumé, le point essentiel de cette approximation est de permettre le remplacement d'un potentiel à deux corps par un potentiel effectif à un corps calculé de façon autocohérente. Chaque particule se déplace dans le champ moyen créé par les autres particules : la méthode de Hartree-Fock est, en fait, une approximation de champ moyen. Ceci se voit le plus clairement dans la déduction qui consiste à briser la hiérarchie BBGKY, en écrivant que la fonction de distribution à deux particules est le produit de deux fonctions de distribution à une particule : la méthode de Hartree-Fock néglige les corrélations. Les détails sont renvoyés à l'exercice 14.5.7. On peut aussi déduire (14.86) à l'aide d'un argument variationnel (§ 15.1.4), qui montre que le déterminant de Slater construit avec les fonction d'onde $\tilde{u}_i$ déterminées de façon autocohérente est la meilleure fonction d'onde de ce type.

# 14.4 États collectifs de bosons

## 14.4.1 La condensation de Bose-Einstein

Le cas des bosons est plus complexe que celui des fermions. Il faut distinguer le cas où le nombre de bosons est variable (photons, phonons, ...), cas qui sera étudié au chapitre 17, et celui où il est fixé (atomes d'hélium$^4$, alcalins). Dans ce dernier cas, à température strictement nulle et en supposant les bosons sans interactions, on obtient l'état fondamental de l'ensemble en mettant tous les bosons dans l'état $\varepsilon_0$ de plus basse énergie. Comme dans le cas des fermions, nous nous limitons à des particules de spin zéro. Le problème consiste à montrer que si la température n'est pas nulle, une fraction *finie* des bosons reste dans cet état fondamental : c'est ce que l'on appelle la *condensation de Bose-Einstein*. Le cas de figure habituellement étudié dans les manuels de mécanique statistique est celui de la condensation dans une boîte de volume $\mathcal{V}$, où les fonctions d'onde sont des ondes planes (14.76) $\exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r})/\sqrt{\mathcal{V}}$. Cette condensation ne se produit pas dans tous les cas de figure, par exemple elle ne se produit pas dans une boîte à deux dimensions, mais on montre qu'elle se produit dans une boîte à trois dimensions. La température où se produit (éventuellement) la condensation de Bose-Einstein peut être estimée en écrivant que les deux longueurs caractéristiques du problème, la longueur d'onde thermique $\lambda_T$ et la distance moyenne entre bosons $d \propto n^{-1/3}$, où $n$ est la densité de particules, sont du même ordre de grandeur : $\lambda_T \sim n^{-1/3}$. Un calcul exact confirme cette estimation. Si $\lambda_T$ est la longueur d'onde thermique définie par[14]

$$\lambda_T = \left(\frac{h^2}{2\pi mkT}\right)^{1/2} \tag{14.87}$$

la température de la condensation est donnée, pour une boîte à trois dimensions, par $\lambda_T = 2.61\, n^{-1/3}$.

La condensation de Bose-Einstein est une transition de phase, et, en toute rigueur, il est nécessaire de prendre la limite thermodynamique $N \to \infty$, $V \to \infty$, $n = N/V$ fixé pour s'assurer de l'existence d'une telle transition (*cf.* Huang [1963], appendice C ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 4). Si le nombre de particules reste fini, un condensat est possible même si la transition de phase n'existe pas à la limite thermodynamique. En toute rigueur, il faut faire la distinction entre la condensation (transition de phase) et la formation d'un condensat (fraction finie des particules dans l'état fondamental).

L'hélium$^4$ superfluide a longtemps été le seul cas d'intérêt physique où la condensation de Bose-Einstein avait (peut-être) une application, le problème étant que la fraction d'atomes dans l'état fondamental est de l'ordre de 10 % à $T = 0$, ce qui est vraiment très loin du gaz parfait. Aujourd'hui, depuis la mise en évidence expérimentale en 1995 de la condensation de Bose-Einstein

14. $\lambda_T$ est la longueur d'onde de de Broglie d'une particule dont l'énergie $\sim kT$. Le facteur $2\pi$ est conventionnel.

dans des gaz d'alcalins[15] à des températures $\lesssim 1\ \mu$K, le cas intéressant est celui de la condensation dans un piège où les atomes se trouvent dans un potentiel $U(\vec{r})$. En pratique, le potentiel $U(\vec{r})$ est approximativement un potentiel d'oscillateur harmonique à trois dimensions, avec le plus souvent une symétrie de révolution : les fréquences vérifient $\omega_x = \omega_y \neq \omega_z$. Afin de simplifier les formules, nous allons supposer les trois fréquences identiques : $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$. Les niveaux d'énergie sont alors de la forme

$$\varepsilon_\alpha = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z) = \hbar\omega\ell_\alpha \qquad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \cdots$$

Nous avons fixé le zéro d'énergie de sorte que l'énergie de l'état fondamental soit nulle : $\varepsilon_0 = \varepsilon(n_x = n_y = n_z = 0) = 0$. Le nombre d'occupation $n_\alpha$ du niveau $\varepsilon_\alpha$ est donné en fonction de $\beta = 1/k_\mathrm{B}T$ et du potentiel chimique $\mu$ par

$$n_\alpha = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)} - 1} = \frac{1}{z^{-1}\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega\ell_\alpha} - 1} \tag{14.88}$$

où nous avons défini la fugacité $z$ par $z = \exp(\beta\mu)$. Pour une température $T$ fixée, $n_\alpha$ est une fonction croissante de $z$, et on doit avoir $0 < z < 1$ car $n_\alpha \geq 0$. À la limite $z \to 0$, on retrouve la statistique de Maxwell-Boltzmann, mais nous nous intéressons à la limite opposée $z \to 1$. Le nombre d'atomes dans l'état $\varepsilon_0 = 0$ est

$$N_0 = \frac{z}{1 - z} \tag{14.89}$$

et $N_0$ diverge lorsque $z \to 1$. Le point essentiel dans la condensation de Bose-Einstein est le suivant : lorsque $T \to 0$ à nombre total d'atomes $N$ fixé, on observe une saturation de la population des niveaux excités, et lorsque les niveaux excités sont saturés, les atomes n'ont plus d'autre choix que de s'accumuler dans l'état fondamental. Inversement, on peut maintenir fixe la température et ajouter des atomes jusqu'à saturation des niveaux excités. Le régime qui nous intéresse est celui où $k_\mathrm{B}T \gg \hbar\omega$, une condition qui peut sembler surprenante dans la mesure où la condensation de Bose-Einstein est un phénomène de très basse température. En fait, le régime opposé $k_\mathrm{B}T \ll \hbar\omega$ n'est pas intéressant, car l'état fondamental serait occupé de façon macroscopique dans ce cas qui est régi par la statistique de Maxwell-Boltzmann. On observe d'ailleurs que la condition $k_\mathrm{B}T \gg \hbar\omega$ est toujours réalisée dans une boîte suffisamment grande[16], car le premier niveau excité est de la forme $\varepsilon_1 \sim \mathcal{V}^{-2/3}$. Soit $N'$ le nombre d'atomes dans l'ensemble des états excités : notre objectif est de trouver une borne supérieure $N'_\mathrm{max}$ pour $N'$. Pour ce faire, nous utilisons le développement suivant

$$\frac{1}{\mathrm{e}^{x} - 1} = \frac{\mathrm{e}^{-x}}{1 - \mathrm{e}^{-x}} = \sum_{p=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-px}$$

15. On a aussi obtenu des condensats avec de l'hydrogène polarisé et des atomes d'$^4$He dans un état métastable.

16. En revanche, la somme sur $\alpha$ est donnée par une intégrale sur $\vec{k}$ qui converge à trois dimensions d'espace, cas où $N'_\mathrm{max}$ reste fini, mais qui diverge à deux dimensions, auquel cas il n'y a pas de condensation.

Compte tenu de ce que la population (14.88) d'un niveau excité est maximale pour $z = 1$ ($\mu = 0$)[17], nous obtenons la borne supérieure

$$\begin{aligned} N'_{\max} &\leq \sum_{p=1}^{\infty}\sum_{\alpha\neq 0} \mathrm{e}^{-p\beta\hbar\omega\ell_\alpha} = \sum_{p=1}^{\infty}\left(\sum_{n_x,n_y,n_z=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-p\beta\hbar\omega\ell_\alpha} - 1\right) \\ &= \sum_{p=1}^{\infty}\left[\left(\frac{1}{1-\mathrm{e}^{-p\beta\hbar\omega}}\right)^3 - 1\right] \end{aligned} \tag{14.90}$$

On peut maintenant développer le terme entre crochets de (14.90) pour $y = p\beta\hbar\omega \ll 1$

$$\left[\left(\frac{1}{1-\mathrm{e}^{-y}}\right)^3 - 1\right] = \frac{1}{y^3} + \frac{3}{2y^2} + \cdots \tag{14.91}$$

et sommer terme à terme pour obtenir[18]

$$N'_{\max} = \zeta(3)\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}\right)^3 + \frac{3\zeta(2)}{2}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}\right)^2 + \cdots \tag{14.92}$$

L'échange de la sommation sur $p$ et de la sommation dans le membre de droite de (14.91) n'est pas valable pour les termes ultérieurs du développement. À l'ordre dominant en $(k_\mathrm{B}T/\hbar\omega)$, la fraction de particules dans l'état fondamental est bornée inférieurement par

$$\frac{N_0}{N} \geq \frac{N - N'_{\max}}{N} \simeq 1 - \frac{\zeta(3)}{N}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}\right)^3 = 1 - \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^3 \tag{14.93}$$

où la température critique de la transition de Bose-Einstein $T_C^0$ est donnée par

$$N = \zeta(3)\left(\frac{k_\mathrm{B}T_C^0}{\hbar\omega}\right)^3 \tag{14.94}$$

Ces résultats se généralisent à un potentiel $U(\vec{r}\,)$ de forme quelconque (mais suffisamment régulière) si l'on utilise une approximation semi-classique (exercice 14.5.8). La température de transition et $N_0/N$, (14.93) et (14.94), sont spécifiques de l'oscillateur harmonique : par exemple, dans le cas de la condensation de Bose-Einstein dans une boîte, la température critique est donnée en

17. La valeur $\mu = 0$ est valable à la limite thermodynamique. Pour $N$ fini, $\mu \sim 1/N$ (*cf.* Huang [1963], chapitre 12 ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 5).

18. On rappelle que la fonction de Riemann $\zeta(n)$ est définie par

$$\zeta(n) = \sum_{p=0}^{\infty}\frac{1}{p^n}$$

avec $\zeta(3/2) \simeq 2.612$, $\zeta(2) = \pi^2/6 \simeq 1.645$, $\zeta(3) \simeq 1.202$.

fonction de la densité $n$ par (14.87) et $N_0/N$ par

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^{3/2} \tag{14.95}$$

### 14.4.2 L'équation de Gross-Pitaevskii

Nous avons jusqu'à présent traité les bosons comme des particules indépendantes. Il nous faut maintenant examiner l'influence des interactions sur la condensation, en nous limitant au cas de la température nulle : $T = 0$. Le potentiel d'interaction $W$ entre deux alcalins est bien connu, mais il n'est pas possible de l'utiliser directement[19]. En effet, nous allons nous servir de techniques inspirées de l'approximation de Hartree-Fock ou de champ moyen, qui négligent les corrélations à deux particules et plus. Ceci suppose que l'interaction soit traitée à l'approximation de Born, ce qui n'est pas possible avec le potentiel $W$. On a recours au pseudo-potentiel du § 13.2.3, valable pour les faibles énergies, et donné en fonction de la longueur de diffusion $a$ et de la masse $m$ des bosons par (13.44)

$$W(\vec{r})\bullet = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\,\delta(\vec{r})\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r\bullet) \tag{14.96}$$

La condition de validité de l'approximation de Born est que l'état de diffusion soit en moyenne peu différent d'une onde plane, ce qui implique $|a|/r \ll 1$ en moyenne, soit $|a| \ll n^{-1/3}$, où $n$ est la densité d'atomes. Nous verrons au § 14.4.3 que le petit paramètre de la théorie est effectivement $(na^3)^{1/2}$, et ce paramètre est de l'ordre de 1 % dans des conditions expérimentales typiques. Dans ces conditions, (14.96) peut être remplacé par

$$W(\vec{r}) \to W_0\,\delta(\vec{r}) \qquad W_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \tag{14.97}$$

Il ne faut surtout pas utiliser ce potentiel au-delà de l'approximation de Born : en fait, l'amplitude de diffusion exacte du potentiel[20] (14.97) est strictement nulle ! En première approximation, tous les bosons ont pour fonction d'onde celle de l'état fondamental $\varphi(\vec{r})$, et la fonction d'onde d'ensemble symétrisée est

$$\Phi(\vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^{N} \varphi(\vec{r}_i) \tag{14.98}$$

19. Un calcul exact de mécanique statistique d'équilibre avec le potentiel exact donnerait un état stable formé de molécules. Les condensats de Bose-Einstein sont des états métastables. Pour former des molécules, il faut passer par l'intermédiaire de collisions à trois corps afin de conserver l'énergie-impulsion, et ces collisions sont très peu probables à faible densité.

20. Le pseudo potentiel et les conditions de sa validité sont étudiées très en détail dans Huang [1963], chapitre 13.

la fonction $\varphi(\vec{r})$ étant normalisée par

$$\int \mathrm{d}^3r\, |\varphi(\vec{r})|^2 = 1 \tag{14.99}$$

Le hamiltonien de l'ensemble des $N$ bosons est

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left[ \frac{\vec{P}_i^2}{2m} + U(\vec{r}) \right] + W_0 \sum_{i<j} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \tag{14.100}$$

et l'énergie de l'état (14.98) se calcule immédiatement

$$E = \langle \Phi | H | \Phi \rangle = N \int \mathrm{d}^3r \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}\varphi)^2 + U(\vec{r})|\varphi(\vec{r})|^2 + \frac{N-1}{2}\, W_0 |\varphi(\vec{r})|^4 \right] \tag{14.101}$$

La densité de bosons est $n(\vec{r}) = N|\varphi(\vec{r})|^2$, et ceci suggère d'introduire une "fonction d'onde de l'état condensé", ou fonction d'onde macroscopique[21]

$$\psi(\vec{r}) = N^{1/2}\varphi(\vec{r}) \qquad |\psi(\vec{r})|^2 = n(\vec{r}) \tag{14.102}$$

L'expression (14.101) de l'énergie se récrit en fonction de $\psi(\vec{r})$

$$E = \int \mathrm{d}^3r \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}\psi)^2 + U(\vec{r})|\psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2}\, W_0 |\psi(\vec{r})|^4 \right] \tag{14.103}$$

Comme $N \gg 1$, nous avons remplacé $N-1$ par $N$. Pour trouver la forme optimale de $\psi$, nous allons utiliser une méthode variationnelle en prenant des variations indépendantes par rapport à $\psi$ et $\psi^*$, avec la contrainte d'un nombre de particules fixé

$$N = \int \mathrm{d}^3r\, |\psi(\vec{r})|^2 \tag{14.104}$$

Il faut donc introduire un multiplicateur de Lagrange, le potentiel chimique $\mu$, et minimiser $E - \mu N$. La minimisation par rapport à $\psi^*$ a pour résultat

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}) + W_0|\psi(\vec{r})|^2 \right] \psi(\vec{r}) = \mu\psi(\vec{r}) \tag{14.105}$$

Cette équation est *l'équation de Gross-Pitaevskii* indépendante du temps, aussi appelée *équation de Schrödinger non linéaire*[22].

Nous allons maintenant supposer $a > 0$, ce qui correspond à des interactions effectives répulsives ; le cas attractif $a < 0$ ne conduit pas à une transition de phase, bien que l'on puisse observer des condensats de quelques milliers

21. Une introduction lumineuse au concept de fonction d'onde macroscopique est donnée dans Feynman *et al.* [1965], vol. III, chapitre 21.

22. Cette équation intervient dans de nombreux domaines de la physique : mécanique des fluides, propagation dans les fibres optiques, etc.

d'atomes. Si l'on met suffisamment d'atomes dans un piège avec des interactions répulsives, on observera un équilibre mécanique dû à une compensation entre les forces harmoniques, qui tendent à ramener les atomes vers le centre du piège, et les forces répulsives, qui tendent à augmenter la taille du condensat. Le rayon $R$ du condensat va devenir très grand par rapport à l'extension de la fonction d'onde du fondamental

$$R \gg \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$$

L'énergie cinétique devient alors beaucoup plus petite que l'énergie potentielle

$$\frac{E_{\text{cin}}}{E_{\text{pot}}} \sim \frac{\hbar^2/(mR^2)}{m\omega^2 R^2} = \left(\frac{\hbar}{m\omega R^2}\right)^2 \ll 1$$

et l'équation de Gross-Pitaevskii se simplifie

$$\left[U(\vec{r}) + W_0|\psi(\vec{r})|^2\right]\psi(\vec{r}) = \mu\psi(\vec{r}) \tag{14.106}$$

La solution de (14.106) s'écrit en fonction de la densité $n(r)$, si on suppose le piège à symétrie sphérique

$$n(r) = |\psi(r)|^2 = \frac{\mu - U(r)}{W_0} \tag{14.107}$$

La limite $r_{\max}$ du condensat est donnée par $U(r_{\max}) = \mu$. L'équation (14.107) s'écrit aussi

$$\mu = W_0\, n(r) + U(r) \tag{14.108}$$

Comme $\mu$ est le potentiel chimique, cette équation implique que l'énergie nécessaire pour ajouter un atome au condensat est, dans le cadre de notre approximation, la somme de l'énergie potentielle $U(r)$ dans le piège et du terme $W_0\, n(r)$ proportionnel à la densité, représentant l'interaction type champ moyen de l'atome supplémentaire avec les atomes du condensat.

Reste à exprimer $\mu$ en fonction du nombre d'atomes. La condition de normalisation de $n$ est

$$N = \int \mathrm{d}^3r\, n(r) = \frac{1}{W_0}\int_{r=0}^{r_{\max}} [\mu - U(r)]\mathrm{d}^3r \tag{14.109}$$

où $r_{\max}$ est déterminé en fonction de $\mu$ par

$$U(r_{\max}) = \frac{1}{2}\, m\omega^2 r_{\max}^2 = \mu$$

ce qui donne

$$N = \frac{8\pi}{15}\left(\frac{2\mu}{m\omega^2}\right)^{3/2}\frac{\mu}{W_0} \tag{14.110}$$

De l'équation familière en thermodynamique $\mu = \partial E/\partial N$ (rappelons que $T = 0$) et $\mu \propto N^{2/5}$, on déduit l'énergie par boson $E/N$

$$\frac{E}{N} = \frac{5}{7}\,\mu \tag{14.111}$$

ce qui montre que $\mu \neq E/N$.

### 14.4.3 L'approximation de Bogoliubov

Le formalisme du champ de Schrödinger que nous avons établi pour les fermions se transpose sans difficulté aux bosons. Aux opérateurs $c_i$ et $c_i^\dagger$, on substitue des opérateurs $a_i$ et $a_i^\dagger$ qui obéissent à des relations de *commutation* canoniques (RCC), analogues à celles (17.42) qui seront écrites pour le champ électromagnétique

$$[a_i, a_i^\dagger] = \delta_{ij} I \qquad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \tag{14.112}$$

On définit par analogie avec (14.54) des champs bosoniques $\psi(\vec r, t)$ et $\psi^\dagger(\vec r, t)$

$$\begin{aligned} \psi(\vec r, t) &= \sum_{i=1}^{\infty} a_i\, u_i(\vec r, t) \\ \psi^\dagger(\vec r, t) &= \sum_{i=1}^{\infty} a_i^\dagger\, u_i^*(\vec r, t) \end{aligned} \tag{14.113}$$

qui obéissent, au lieu de (14.55), à des relations de commutation à temps égaux

$$[\psi(\vec r, t), \psi(\vec r\,', t)] = [\psi^\dagger(\vec r, t), \psi^\dagger(\vec r\,', t)] = 0 \qquad [\psi(\vec r, t), \psi^\dagger(\vec r\,', t)] = \delta(\vec r - \vec r\,') I \tag{14.114}$$

L'opérateur nombre de bosons $\mathsf{N}$ et les relations de commutation de $\mathsf{N}$ avec $\psi$ et $\psi^\dagger$ sont identiques à (14.56) et (14.58). La fonction d'onde à $N$ bosons est donnée par (14.60) et le hamiltonien par (14.63). Nous nous plaçons dans le cas invariant par translation ($U = 0$), c'est-à-dire dans une boîte de volume $\mathcal{V}$, et compte tenu de (14.81) et de (14.97), le hamiltonien effectif est

$$\boxed{H = \sum_{\vec k} \varepsilon^0_{\vec k} a^\dagger_{\vec k}\, a_{\vec k} + \frac{\mathcal{W}_0}{2\mathcal{V}} \sum_{\vec k, \vec k\,', \vec q} a^\dagger_{\vec k + \vec q}\, a^\dagger_{\vec k\,' - \vec q}\, a_{\vec k\,'}\, a_{\vec k}} \tag{14.115}$$

avec $\varepsilon^0_{\vec k} = \hbar^2 k^2/2m$. Comme première application du formalisme opératoriel, nous allons retrouver l'équation de Gross-Pitaevskii. L'équation du mouvement du champ $\psi$ est donnée par la même formule que dans le cas des fermions (14.72)

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi(\vec r, t)}{\partial t} &= (K + U)\psi(\vec r, t) + \int \mathrm{d}^3 r'\, \psi^\dagger(\vec r\,', t) W(\vec r, \vec r\,') \psi(\vec r\,', t) \psi(\vec r, t) \\ &= \left[K + U + W_0 \psi^\dagger(\vec r, t)\psi(\vec r, t)\right] \psi(\vec r, t) \end{aligned} \tag{14.116}$$

Remplaçons l'opérateur de champ $\psi$ par un champ classique, en conservant la même notation. L'interprétation physique de $|\psi|^2$ est la même que précédemment, car le nombre de bosons est d'après (14.56)

$$N = \int \mathrm{d}^3r \, |\psi(\vec{r})|^2 \tag{14.117}$$

et $|\psi(\vec{r})|^2$ est la densité $n(\vec{r})$. Le remplacement par un champ classique dans (14.116) nous donne une équation du mouvement pour ce champ : l'équation de Gross-Pitaevskii est donc une approximation classique, qui néglige les fluctuations quantiques. Un condensat de Bose-Einstein est, en première approximation, un état classique d'un champ atomique.

Poursuivant cette approche à l'équation de Gross-Pitaevskii, nous allons maintenant prendre en compte les fluctuations quantiques en décomposant l'opérateur de champ en une partie classique et un champ quantique que nous allons traiter à l'ordre le plus bas

$$\psi = \sqrt{N_0} + \delta\psi \tag{14.118}$$

La partie classique $\sqrt{N_0}$ est uniforme en raison de l'invariance par translation, et elle est normalisée par le nombre $N_0$ de bosons *dans l'état fondamental* d'impulsion nulle $\hbar\vec{k} = 0$. Nous supposons que $(N - N_0) \ll N$ : le nombre de bosons dans les états excités $\vec{k} \neq 0$ doit rester petit, et l'opérateur $\delta\psi$ sera traité comme une correction. La décomposition (14.118) revient à remplacer les opérateurs $a_0$ et $a_0^\dagger$ par $\sqrt{N_0}$, et manifestement elle ne conserve pas le nombre de particules. C'est un inconvénient de cette approche initiale de Bogoliubov ; on peut éviter cette approximation (voir par exemple Castin [2001], section 7, ou Leggett [2001], section VIII), mais le formalisme devient plus lourd et nous nous en tiendrons à (14.118) dans cet exposé élémentaire. Le développement de $\delta\psi$ contient uniquement des impulsions $\hbar\vec{k} \neq 0$

$$\delta\psi = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\vec{k}\neq 0} a_{\vec{k}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{14.119}$$

Dans ces conditions, en reportant la décomposition (14.118) dans l'expression (14.115) de $H$ et en conservant seulement les termes quadratiques en $\delta\psi$ et $\delta\psi^\dagger$, on obtient

$$H = \frac{N_0^2 W_0}{2\mathcal{V}} + \sum_{\vec{k}\neq 0} (\varepsilon^0_{\vec{k}} + 2n_0 W_0) a^\dagger_{\vec{k}} \, a_{\vec{k}} + \frac{n_0 W_0}{2} \sum_{\vec{k}\neq 0} \left( a^\dagger_{\vec{k}} \, a^\dagger_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}} \, a_{-\vec{k}} \right) \tag{14.120}$$

Le facteur 2 devant $n_0 W_0$ est dû à l'addition du terme direct et du terme d'échange, voir (14.84) : le signe $(-)$ devant le terme d'échange devient un signe $(+)$ dans le cas de bosons. L'expression précédente pour $H$ a l'inconvénient de faire intervenir $N_0$, qui est inconnu. Il est préférable de tout exprimer

en fonction de $N$ en utilisant

$$\mathsf{N} = N_0 + \sum_{\vec{k}\neq 0} a^\dagger_{\vec{k}}\, a_{\vec{k}}$$

et (14.120) se met sous la forme suivante, en symétrisant le deuxième terme et en remplaçant $\mathsf{N}$ par sa valeur numérique $N$

$$\begin{aligned} H \;\; = \;\; & \frac{N^2 W_0}{2\mathcal{V}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}\neq 0}\left(\varepsilon^0_{\vec{k}} + n_0 W_0\right)\left(a^\dagger_{\vec{k}}\, a_{\vec{k}} + a^\dagger_{-\vec{k}}\, a_{-\vec{k}}\right) \\ & + \frac{n_0 W_0}{2}\sum_{\vec{k}\neq 0}\left(a^\dagger_{\vec{k}}\, a^\dagger_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}\, a_{-\vec{k}}\right) \end{aligned} \tag{14.121}$$

Comme $N$ est peu différent de $N_0$, on peut remplacer $n_0$ par $n$ dans le cadre de nos approximations ; les termes $aa$ et $a^\dagger a^\dagger$ ne conservent pas le nombre de particules excitées, et on considère que les particules dans l'état fondamental $\vec{k} = 0$ jouent le rôle de réservoir de particules $\vec{k} \neq 0$. Le hamiltonien (14.121) est diagonalisé grâce à la *transformation de Bogoliubov*, qui est une transformation canonique : elle préserve les relations de commutation[23]. Cette transformation consiste à définir des opérateurs $b_{\vec{k}}$ et $b^\dagger_{\vec{k}}$ par

$$a_{\vec{k}} = u_{\vec{k}}\, b_{\vec{k}} - v_{\vec{k}}\, b^\dagger_{-\vec{k}} \qquad\qquad a_{-\vec{k}} = u_{\vec{k}}\, b_{-\vec{k}} - v_{\vec{k}}\, b^\dagger_{\vec{k}} \tag{14.122}$$

où les coefficients réels $u_{\vec{k}}$ et $v_{\vec{k}}$ vérifient $u^2_{\vec{k}} - v^2_{\vec{k}} = 1$. En inversant (14.122), on s'assure que les relations de commutation de $b_{\vec{k}}$ et $b^\dagger_{\vec{k}}$ sont bien les RCC

$$[b_{\vec{k}}, b^\dagger_{\vec{k}'}] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\, I \qquad\qquad [b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'}] = [b^\dagger_{\vec{k}}, b^\dagger_{\vec{k}'}] = 0$$

Le vide $|\Psi_0\rangle$ des nouveaux opérateurs est défini par $b_{\vec{k}}|\Psi_0\rangle = 0 \;\; \forall\vec{k} \neq 0$. Le choix suivant des coefficients $u_{\vec{k}}$ et $v_{\vec{k}}$

$$u_{\vec{k}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\xi_{\vec{k}}}{\varepsilon_{\vec{k}}} + 1\right) \qquad\qquad v_{\vec{k}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\xi_{\vec{k}}}{\varepsilon_{\vec{k}}} - 1\right)$$

avec $\xi_{\vec{k}} = \varepsilon^0_{\vec{k}} + nW_0$ et

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \sqrt{(\varepsilon^0_{\vec{k}} + nW_0)^2 - (nW_0)^2} \tag{14.123}$$

permet d'éliminer les termes en $b_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}$ et $b^\dagger_{\vec{k}} b^\dagger_{-\vec{k}}$ et de diagonaliser le hamiltonien en le mettant sous la forme du hamiltonien d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques indépendants

$$H = \frac{N^2 W_0}{2\mathcal{V}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}\neq 0} \varepsilon_{\vec{k}} b^\dagger_{\vec{k}} b_{\vec{k}} - \frac{1}{2}(\varepsilon^0_{\vec{k}} + nW_0 - \varepsilon_{\vec{k}}) \tag{14.124}$$

23. Cette transformation est identique à celle utilisée pour obtenir les états comprimés dans le § 17.2.1.

L'équation (14.123) définit une loi de dispersion pour les *excitations élémentaires*, ou *quasi-particules* : l'opérateur $b^\dagger_{\vec{k}}$ appliqué à $|\Psi_0\rangle$ crée une excitation élémentaire d'impulsion $\hbar\vec{k}$ et d'énergie $\varepsilon_{\vec{k}}$, et le condensat se comporte comme un gaz d'excitations élémentaires indépendantes. Pour des petites valeurs de $k$, on trouve une loi de dispersion linéaire

$$\varepsilon_{\vec{k}} \simeq \left(\frac{\hbar n W_0}{m}\right) k = \left(\frac{4\pi\hbar^2 na}{m^2}\right) k = \hbar c_s k \tag{14.125}$$

Ce calcul confirme que l'on doit avoir $a > 0$ : le cas $a < 0$ conduit à des instabilités, car l'argument de la racine carrée dans (14.123) peut devenir négatif. L'équation (14.125) définit une vitesse du son $c_s = nW_0/m$. Les excitations élémentaires dans le condensat sont donc des phonons, comme ceux de l'hélium$^4$. La densité d'atomes dans les états excités peut se calculer comme

$$n_{\rm exc} = \frac{1}{\mathcal{V}}\sum_{\vec{k}\neq 0} v^2_{\vec{k}} = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\, v^2_{\vec{k}} = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{mc_s}{\hbar}\right)^3$$

équation qui se met sous la forme

$$\frac{n_{\rm exc}}{n} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}}(na^3)^{1/2} \tag{14.126}$$

Notre approximation de départ (14.118) reposait sur la condition $n_{\rm exc}/n \ll 1$. La cohérence de notre calcul implique la condition $(na^3)^{1/2} \ll 1$, et le petit paramètre est $(na^3)^{1/2}$. Le calcul de l'énergie de l'état fondamental $E_0$ est plus délicat. Comme l'état fondamental est caractérisé par $b_{\vec{k}}|\Psi_0\rangle = 0$, on pourrait naïvement penser que

$$\frac{E_0}{\mathcal{V}} = \frac{n^2 W_0}{2} - \frac{1}{2\mathcal{V}}\sum_{\vec{k}\neq 0}(\varepsilon^0_{\vec{k}} + nW_0 - \varepsilon_{\vec{k}})$$

mais ce résultat est incorrect, parce que l'on utilise le potentiel (14.97) en dehors de son domaine de validité, et il faut revenir au pseudo-potentiel (14.96). Le calcul correct (Huang [1963] chapitre 19) donne

$$\frac{E_0}{\mathcal{V}} = \frac{n^2 W_0}{2}\left[1 + \frac{128}{15\sqrt{\pi}}\,(na^3)^{1/2}\right] \tag{14.127}$$

En résumé, le petit paramètre de l'approximation de Bogoliubov est $(na^3)^{1/2}$. La condition $(na^3)^{1/2} \ll 1$ est précisément celle de validité de l'approximation de Born pour le pseudo-potentiel, et elle est bien vérifiée dans des conditions expérimentales typiques où ce paramètre $\lesssim 1$ %. Il reste à généraliser l'approximation de Bogoliubov au cas d'un piège non invariant par translation. Cette généralisation est possible, et nous renvoyons le lecteur intéressé à la bibliographie.

La propriété la plus remarquable des condensats de Bose-Einstein est celle de superfluidité, c'est-à-dire l'existence d'écoulements présentant une viscosité nulle, propriété que ces condensats partagent avec d'autres systèmes physiques. L'$^4$He est superfluide à des températures $\lesssim 3\,$K, l'$^3$He à des températures $\lesssim 2\,$mK, et la supraconductivité présente de nombreux traits communs avec la superfluidité. Cependant, la superfluidité est un phénomène dont la description théorique est complexe, parce qu'elle fait intervenir des situations hors équilibre, et son étude détaillée sort du cadre de ce livre. Dans la situation simple de l'écoulement d'un superfluide dans un tore, on montre que la circulation de la vitesse le long d'un contour fermé tracé à l'intérieur du tore est quantifiée en unités de $2\pi\hbar/m$. Un écoulement correspondant à une circulation $2\pi p\hbar/m$, $p$ entier, est en fait un état métastable de très longue durée de vie. On observe également des vortex, ou tourbillons, dans un superfluide, et à nouveau la circulation de la vitesse est quantifiée en unités de $2\pi\hbar/m$ le long d'un contour fermé tracé autour du cœur du vortex.

## 14.5 Exercices

### 14.5.1 Particule $\Omega^-$ et couleur

L'hypéron $\Omega^-$ (masse 1675 MeV/c$^2$) est une particule de spin 3/2, composée de trois quarks étranges de spin 1/2. Le modèle des quarks requiert que la fonction d'onde spatiale ne s'annule pas. En déduire que les trois quarks ne peuvent pas être tous identiques. Au début des années 1970, cette observation a fourni un des arguments en faveur de l'introduction du concept de "couleur" (à l'origine de la chromodynamique quantique) permettant de distinguer entre les quarks : les trois quarks du $\Omega^-$ ont des couleurs différentes.

### 14.5.2 Parité du méson $\pi$

**1.** Si l'on envoie des mésons $\pi^-$ de basse énergie sur une cible de deutérium, ces mésons peuvent être capturés et former des états liés analogues à ceux d'un atome d'hydrogène. Donner l'expression de l'énergie de ces états liés méson $\pi$-deutérium, sachant que la masse du méson $\pi$ est de l'ordre de 139 MeV/c$^2$ et celle du deutérium de 1875 MeV/c$^2$. Le méson $\pi$ est capturé dans un état de nombre quantique principal $n$ élevé et termine sa cascade radiative dans le niveau fondamental[24] $1s$ après émission de photons. Montrer que l'énergie de ces photons se place dans le domaine des rayons X.

**2.** Une fois arrivé dans l'état $1s$, le méson $\pi$ subit une interaction nucléaire qui entraîne la réaction

$$\pi^- + {}^2\mathrm{H} \to n + n$$

24. La réaction nucléaire a aussi une petite probabilité de se produire dans un état $ns$, $n \neq 1$, c'est-à-dire pour des états où la probabilité de présence est non nulle à l'origine, mais cela ne change pas l'argument.

avec deux neutrons $n$ dans l'état final. Sachant que le spin du noyau de deutérium (ou deutéron) est 1 et que celui du méson $\pi^-$ est nul, quel est l'état de moment angulaire initial de la réaction ? Montrer que les deux neutrons finaux ne peuvent être que dans l'état de moment angulaire orbital total $L = 1$ et de spin total $S = 1$, c'est-à-dire dans l'état ${}^3P_1$. Si l'on attribue par convention une parité positive aux nucléons (protons et neutrons), et sachant que le moment angulaire orbital du deutéron est nul[25] (le deutéron est un état ${}^3S_1$), en déduire que le méson $\pi$ a une parité négative. La parité est conservée dans la réaction.

### 14.5.3 Fermions de spin 1/2 dans un puits infini

On considère deux fermions identiques de spin 1/2 dans un puits de potentiel cubique infini de côté $L$. Si ces deux fermions sont sans interaction entre eux, quelles sont les valeurs propres possibles de l'énergie totale et les fonctions d'onde correspondantes (espace et spin) ? On suppose que les deux fermions interagissent *via* un potentiel

$$V = V_0\, \delta^{(3)}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

où $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ sont les positions des deux fermions. Montrer que les états triplets ne sont pas affectés par ce potentiel.

### 14.5.4 Désintégration du positronium

Le positronium est un état lié électron-positron $(e^- - e^+)$ ; le positron est une particule ayant la même masse $m_e$ que l'électron et une charge opposée $-q_e$.

**1.** On ne tient pas compte dans cette question du spin des deux particules. Sachant que les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène pour un proton infiniment lourd sont de la forme $(e^2 = q_e^2/(4\pi\varepsilon_0))$

$$E_n = \frac{E_0}{n^2} = -\frac{1}{2}\,\frac{m_e e^4}{\hbar^2}\,\frac{1}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

quels sont les niveaux d'énergie du positronium ?

**2.** L'électron et le positron ont un spin 1/2. L'état de plus basse énergie, ou état fondamental $n = 1$, a un moment angulaire orbital $l = 0$ (onde $s$). Quelles sont les valeurs possibles du moment angulaire total $j$ du positronium dans cet état $n = 1$ ?

**3.** Le positronium dans son état fondamental se désintègre en deux[26] photons

$$e^- + e^+ \to 2\gamma$$

25. Le deutéron a aussi une petite composante d'onde $d$, et donc une composante ${}^3D_1$, mais cela n'affecte en rien l'argument.

26. La désintégration $e^- + e^+ \to \gamma$ est interdite par la conservation de l'énergie-impulsion.

Dans le référentiel où le positronium est au repos, les deux photons partent avec des impulsions opposées. On choisit pour axe $Oz$ la direction de l'impulsion de l'un des photons. En utilisant la conservation du moment angulaire, montrer que les deux photons ont nécessairement la *même polarisation circulaire*, soit droite, soit gauche. Suggestion : dessiner un schéma de la désintégration.

**4.** En examinant l'effet d'une rotation de $\pi$ autour de l'axe $Oy$ et en tenant compte de l'identité des deux photons, montrer que seul un des deux états de moment angulaire $j$ du positronium peut se désintégrer en deux photons[27].

**5.** Soit $\Pi$ l'opérateur parité, qui agit sur l'état $|A\rangle$ d'une particule $A$ suivant $\Pi|A\rangle = \eta_A|A\rangle$, où $\eta_A$ est la parité de $A$. On peut montrer que $\eta_{e^-}\eta_{e^+} = -1$. En déduire que la parité de l'état fondamental du positronium est $-1$. On peut écrire les deux états possibles pour les deux photons sous la forme

$$\text{(i)}\ \ |\Phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|DD\rangle + |GG\rangle\Big) \qquad\qquad \text{(ii)}\ \ |\Phi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|DD\rangle - |GG\rangle\Big)$$

où $|D\rangle$ et $|G\rangle$ représentent des états de polarisation circulaire droite et gauche. Lequel des états (i) ou (ii) est obtenu dans la désintégration du positronium[28], sachant que la parité est conservée ?

## 14.5.5 Lame séparatrice et fermions

On reprend l'expérience décrite sur la figure 17.3, en remplaçant les photons incidents par des fermions dans un même état de spin. Les opérateurs correspondant aux modes $a$ et $b$ vérifient les RAC

$$\{a, a^\dagger\} = \{b, b^\dagger\} = I$$

Montrer que l'opérateur $G$ (17.65) est dans ce cas

$$G = ab^\dagger - a^\dagger b$$

et calculer l'action de $U(\lambda) = \exp(\mathrm{i}\lambda G)$ sur les opérateurs $a$ et $b$. Que se passe-t-il à la sortie de la lame si l'état à l'entrée de la lame est $|1_a 1_b\rangle$ ?

## 14.5.6 Fonctions d'onde et opérateurs de champ

**1.** Écrire la représentation matricielle des opérateurs $c_i$, $c_i^\dagger$ et $\mathsf{N_i}$ avec le choix suivant de vecteurs de base

$$|n_i = 0\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \qquad\qquad |n_i = 1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

27. L'autre état doit se désintégrer en trois photons. Le "boson de Higg" découvert au CERN en juillet 2012 se désintégrant en 2 photons ne peut pas avoir un spin 1.

28. Les corrélations de polarisation des deux photons ont été mesurées par Wu et Shaknow [1950], qui ont pu vérifier que la parité de l'état fondamental était bien $-1$.

Vérifier les RAC (14.48) en utilisant les propriétés du facteur $\eta_i$ (14.45).

**2.** Soit $S$ une matrice unitaire. Définissons les opérateurs $b_j$ à partir des $c_i$ par

$$b_j = \sum_k S_{jk}\, c_k$$

Montrer que cette transformation est une transformation canonique, c'est-à-dire qu'elle préserve les relations d'(anti)commutation

$$\{b_j, b_m^\dagger\} = \delta_{jm}\, I \qquad \{b_j, b_m\} = \{b_j^\dagger, b_m^\dagger\} = 0$$

Au lieu d'une base de fonctions d'onde orthonormées $u_i(\vec{r}\,)$ (14.54), on choisit une autre base

$$v_j = \sum_k S_{jk}^{-1}\, u_k$$

Montrer que l'opérateur de champ est

$$\psi(\vec{r}\,) = \sum_j b_j v_j(\vec{r}\,)$$

**3.** Montrer que la fonction d'onde (14.62) est identique au déterminant de Slater (14.41). Suggestion : les niveaux étant rangés dans l'ordre

$$\alpha_1 < \alpha_2 < \cdots < \alpha_N$$

montrer que le terme

$$u_{\alpha_1}(\vec{r}_1)\, u_{\alpha_2}(\vec{r}_2) \cdots u_{\alpha_N}(\vec{r}_N)$$

a le même signe que dans le développement du déterminant de Slater.

### 14.5.7 Hiérarchie BBGKY et approximation de Hartree-Fock

**1.** On définit la matrice statistique à une particule (à un facteur multiplicatif $N$ près) pour un état à $N$ fermions $|\Phi_N\rangle$ par

$$\rho^{(1)}(\vec{x},\vec{y}\,) = \langle\Phi_N|\psi^\dagger(\vec{y}\,)\psi(\vec{x}\,)|\Phi_N\rangle = \langle\vec{x}\,|\rho^{(1)}|\vec{y}\,\rangle \tag{14.128}$$

Montrer que

$$\mathrm{Tr}\,\rho^{(1)} = \int \mathrm{d}^3 z\, \rho^{(1)}(\vec{z},\vec{z}\,) = N$$

Quelle est l'interprétation physique de $\rho^{(1)}(\vec{z},\vec{z}\,)$ ? Écrire $\mathrm{Tr}\,\rho^{(1)}$ en terme de la fonction d'onde $\Phi_N(\vec{x}_1,\vec{x}_2,\cdots,\vec{x}_N)$

$$\rho^{(1)}(\vec{x},\vec{y}\,) = N \int \mathrm{d}^3x_2 \cdots \mathrm{d}^3x_N\, \Phi_N^*(\vec{y},\vec{x}_2,\cdots,\vec{x}_N)\Phi_N(\vec{x},\vec{x}_2,\cdots,\vec{x}_N)$$

Suggestion : utiliser (14.61). Si $|\Phi_N\rangle$ est un état défini par des nombres d'occupation $n_1 = n_2 = \cdots = n_N = 1$, tous les autres $n_i$ étant nuls, montrer que

$$\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}\,) = \sum_{i=1}^{N} u_i(\vec{x}\,)u_i^*(\vec{y}) \tag{14.129}$$

où les $u_i$ sont les fonctions propres d'un hamiltonien à une particule $h_1$

$$h_1 u_i(\vec{x}\,) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla_x^2 + U(\vec{x}\,)\right] u_i(\vec{x}\,) = \varepsilon_i u_i(\vec{x}\,) \tag{14.130}$$

En déduire que l'évolution de $\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}\,; t)$ peut s'écrire

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho^{(1)} = [h_1, \rho^{(1)}]$$

**2.** La matrice statistique à deux particules (à un facteur multiplicatif $N(N-1)$ près) est définie par

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{y}_1, \vec{y}_2) = \langle\Phi_N|\psi^\dagger(\vec{y}_1)\psi^\dagger(\vec{y}_2)\psi(\vec{x}_2)\psi(\vec{x}_1)|\Phi_N\rangle \tag{14.131}$$

Montrer que $\rho^{(2)}$ est antisymétrique dans l'échange $\vec{x}_1 \leftrightarrow \vec{x}_2$ (ou $\vec{y}_1 \leftrightarrow \vec{y}_2$) et que la trace partielle sur la particule 2 est donnée par

$$\mathrm{Tr}_2\,\rho^{(2)} = \int \mathrm{d}^3 z\, \rho^{(2)}(\vec{x}, \vec{z}; \vec{y}, \vec{z}) = (N-1)\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}\,)$$

Quelle est l'interprétation physique de $\rho^{(2)}(\vec{x}, \vec{y}; \vec{x}, \vec{y})$ ? Donner l'expression de $\rho^{(2)}$ dans le cas de fermions indépendants et vérifier que $\mathrm{Tr}_2\rho^{(2)} = (N-1)\rho^{(1)}$.

**3.** On se propose d'obtenir l'équation d'évolution de $\rho^{(1)}$ lorsque le hamiltonien est donné par (14.63). Montrer que la contribution de $\mathcal{W}$ à cette évolution est

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t^{\mathcal{W}} \rho^{(1)} = \int \mathrm{d}^3 z\ [W(\vec{z}, \vec{x}_1) - W(\vec{z}, \vec{y}_1)]\, \rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{z}; \vec{y}_1, \vec{z})$$

et que l'équation d'évolution complète peut s'écrire sous la forme

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho^{(1)} = [h_1, \rho^{(1)}] + \mathrm{Tr}_2\left([\mathcal{W}, \rho^{(2)}]\right)$$

Suggestion : justifier l'égalité

$$\langle\vec{x}_1\vec{x}_2|W|\vec{y}_1\vec{y}_2\rangle = \delta^{(3)}(\vec{x}_1 - \vec{y}_1)\delta^{(3)}(\vec{x}_2 - \vec{y}_2)W(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$$

L'équation d'évolution de $\rho^{(1)}$ fait intervenir $\rho^{(2)}$, on montrerait de même que celle de $\rho^{(2)}$ fait intervenir $\rho^{(3)}$, etc. : c'est la hiérachie dite BBGKY[29].

29. Born, Bogoliubov, Green, Kirkwood et Yvon.

**4.** *Approximation de Hartree.* Pour “briser la hiérarchie BBGKY”, on utilise l’approximation de Hartree : on suppose que $\rho^{(2)}$ s’exprime en fonction de $\rho^{(1)}$, autrement dit on néglige les corrélations à deux particules

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1,\vec{x}_2;\vec{y}_1,\vec{y}_2) \simeq \rho^{(1)}(\vec{x}_1,\vec{y}_1)\rho^{(1)}(\vec{x}_2,\vec{y}_2) \tag{14.132}$$

Montrer que l’action de $\mathcal{W}$ se réduit alors à celle d’un potentiel à une particule

$$W_{\text{eff}}(\vec{x}_1) = \int \mathrm{d}^3z\, W(\vec{z},\vec{x}_1)\rho^{(1)}(\vec{z},\vec{z})$$

Soit $\tilde{u}_i(\vec{x}\,)$, les fonctions propres du hamiltonien effectif à une particule

$$h_1^{\text{eff}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla_x^2 + U(\vec{x}\,) + W_{\text{eff}}(\vec{x}\,) \qquad\qquad h_1^{\text{eff}}\tilde{u}_i(\vec{x}\,) = \tilde{\varepsilon}_i\tilde{u}_i(\vec{x}\,)$$

Montrer que

$$\rho^{(1)}(\vec{x},\vec{y}\,) = \sum_{i=1}^{N} \tilde{u}_i(\vec{x}\,)\tilde{u}_i^*(\vec{y}) \tag{14.133}$$

où les $\tilde{u}_i$ vérifient

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla_x^2 + U(\vec{x}\,) + \sum_{k=1}^{N}\int \mathrm{d}^3z\,\tilde{u}_k^*(\vec{z}\,)W(\vec{z},\vec{x}\,)\tilde{u}_k(\vec{z}\,)\right]\tilde{u}_i(\vec{x}\,) = \tilde{\varepsilon}_i\tilde{u}_i(\vec{x}\,) \tag{14.134}$$

Ces équations sont les équations de Hartree. Le potentiel effectif

$$W_{\text{eff}}(\vec{x}\,) = \sum_{k=1}^{N}\int \mathrm{d}^3z\,\tilde{u}_k^*(\vec{z}\,)W(\vec{z},\vec{x}_1)\tilde{u}_k(\vec{z}\,)$$

dépend des fonctions inconnues $\tilde{u}_i(\vec{x}\,)$. Pour déterminer les $\tilde{u}_i$, on part de $\tilde{u}_i = u_i$ pour calculer $W_{\text{eff}}$ et on procède par itération jusqu’au moment où l’équation (14.134) est satisfaite ; la méthode de Hartree est une méthode autocohérente.

**5.** *Approximation de Hartree-Fock.* L’approximation faite pour obtenir les équations de Hartree n’obéit pas à la propriété d’antisymétrie de $\rho^{(2)}$ dans l’échange $\vec{x}_1 \leftrightarrow \vec{x}_2$. L’approximation de Hartree-Fock consiste à écrire

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1,\vec{x}_2;\vec{y}_1,\vec{y}_2) \simeq \rho^{(1)}(\vec{x}_1,\vec{y}_1)\rho^{(1)}(\vec{x}_2,\vec{y}_2) - \rho^{(1)}(\vec{x}_2,\vec{y}_1)\rho^{(1)}(\vec{x}_1,\vec{y}_2) \tag{14.135}$$

Vérifier que cette hypothèse est correcte pour des fermions indépendants. Montrer que l’on doit ajouter au membre de gauche de (14.134), le terme d’échange

$$-\sum_{k=1}^{N}\int \mathrm{d}^3z\,\tilde{u}_k^*(\vec{z}\,)W(\vec{z},\vec{x}\,)\tilde{u}_k(\vec{x})\tilde{u}_i(\vec{z}\,) \tag{14.136}$$

### 14.5.8 Approximation semi-classique pour la condensation dans un piège

**1.** On se propose d'étudier la condensation de Bose-Einstein pour des bosons non-relativistes de spin zéro et de masse $m$, soumis à un potentiel extérieur $U(\vec{r})$ supposé lentement variable dans l'espace. En examinant le décompte des niveaux dans une boîte de volume $\ell^3$ telle que $U(\vec{r})$ soit lentement variable sur une distance $\ell$, montrer que la densité de niveaux s'écrit

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2\pi\,(2m)^{3/2}}{h^3}\int \mathrm{d}^3 r\,\sqrt{\varepsilon - U(\vec{r})}\,\theta[\varepsilon - U(\vec{r})]$$

où $\theta(x)$ représente la fonction de Heaviside. Une deuxième méthode consiste à utiliser une approximation semi-classique de la densité d'états

$$\rho(\varepsilon) = \int \frac{\mathrm{d}^3 p\,\mathrm{d}^3 r}{h^3}\,\delta[\varepsilon - H(\vec{p}, \vec{r})]$$

Écrire le hamiltonien $H(\vec{p}, \vec{r})$ d'une particule et retrouver le résultat précédent pour $\rho(\varepsilon)$. Dans le cas de bosons libres confinés dans une boîte de volume $\mathcal{V}$, que vaut $U(\vec{r})$ ? Retrouver dans ce cas l'expression usuelle de $\rho(\varepsilon)$.

**2.** On prend pour $U(\vec{r})$ l'énergie potentielle d'un oscillateur harmonique

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{2} m\,\omega^2\,r^2$$

Calculer $\rho(\varepsilon)$. On donne

$$\int_0^1 \mathrm{d}u\,u^2(1-u^2)^{1/2} = \frac{\pi}{16}$$

Par un choix judicieux du zéro d'énergie, le potentiel chimique peut être choisi nul à la transition de Bose-Einstein. Retrouver (14.94).

**3.** Dans l'expérience de Mewes *et al.* [1996], des atomes de sodium sont confinés dans un piège magnétique et leur énergie potentielle est celle d'un oscillateur harmonique tridimensionnel de fréquence $\omega = 2\pi \times 122\,\mathrm{Hz}$ ; le nombre d'atomes dans le piège est $N = 15 \times 10^6$. Quelle est la température de transition ? (En réalité le piège est asymétrique, et $\omega$ représente une valeur moyenne).

**4.** Revenant à une énergie potentielle quelconque, montrer que pour $T = T_C$ la densité de particules en fonction de $\vec{r}$ est donnée par

$$n(\vec{r}) = \frac{2\pi\,(2m)^{3/2}}{h^3}\int_{U(\vec{r})}^{\infty} \frac{\left[\varepsilon - U(\vec{r})\right]^{1/2}}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon} - 1}\,\mathrm{d}\varepsilon$$

Quel choix a-t-on fait pour le zéro d'énergie ? Montrer qu'à la transition

$$n(\vec{r} = 0) = \left(\frac{2\pi m k_{\mathrm{B}} T_C}{\hbar^2}\right)^{3/2} \zeta(3/2)$$

si $U(\vec{r}\,)$ a un minimum absolu à $r = 0$. Calculer numériquement cette densité pour l'expérience de Mewes *et al.* [1996]. La masse de l'atome de sodium utilisé dans l'expérience vaut $m = 3.8 \times 10^{-26}$ kg.

## 14.6 Bibliographie

Pour un exposé très lucide sur les particules identiques, voir Ballentine [1998], chapitre 17 ou Peres [1993], chapitre 5. Les présentations de Lévy-Leblond et Balibar [1984], chapitre 7, Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitre 4, Cohen-Tannnoudji *et al.* [1973], chapitre XIV ou Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 16 sont également utiles. Le théorème spin-statistique est démontré dans Streater et Wightman [1964]. Pour les états collectifs on pourra consulter Diu *et al.* [1990], chapitre 4, Balian [1991], chapitres 10 à 12, ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 5. On trouvera un exposé introductif sur les condensats de Bose-Einstein dans Cohen-Tannoudji *et al.* [2005] et des exposés très complets dans Cohen-Tannoudji [1999], Castin [2001], Leggett [2001], ou Pethick et Smith [2002]. Bien que l'édition originale de ces deux livres date de près d'un demi-siècle, la lecture de Pines et Nozières [1989] (fermions) et Nozières et Pines [1990] (bosons) est toujours aussi stimulante. Enfin, pour un exposé magistral sur les fluides quantiques, on se reportera à Leggett [2006].

# Chapitre 15

# Atomes à un électron

Ce chapitre est une introduction à la physique atomique limitée aux atomes à un électron, le cas des atomes complexes étant renvoyé au chapitre suivant. Après un bref exposé dans la section 15.1 des méthodes de perturbation et variationnelle, nous discuterons dans la section 15.2 des structures fine et hyperfine des niveaux d'énergie ainsi que de l'effet d'un champ magnétique sur ces niveaux. Enfin, nous donnerons dans la section 15.3 une introduction à un sujet en pleine expansion depuis les années 1980, la manipulation d'atomes par laser, en décrivant le refroidissement Doppler et les pièges magnéto-optiques.

## 15.1 Méthodes d'approximation

### 15.1.1 Généralités

En physique classique, il est exceptionnel que l'on puisse résoudre analytiquement les équations de Newton ou celles de Maxwell, étant donné les conditions initiales à un temps $t = t_0$ et les forces dans le premier cas, les sources du champ électromagnétique dans le second. En général, on doit avoir recours à une méthode de résolution approchée : intégration numérique des équations, méthode de perturbation ou autre. La situation n'est pas différente en physique quantique : il est exceptionnel que l'on sache "résoudre l'équation de Schrödinger" de façon exacte, c'est-à-dire obtenir l'évolution temporelle du vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ en fonction de sa valeur $|\varphi(t_0)\rangle$ à un temps initial $t = t_0$. Dans le cas où le hamiltonien est indépendant du temps, ce qui sera le cas considéré dans cette section, la connaissance de cette évolution temporelle suppose que l'on sache diagonaliser le hamiltonien, c'est-à-dire trouver ses valeurs propres et ses vecteurs propres. Sauf cas très particulier (puits carré, oscillateur harmonique, atome d'hydrogène...), on ne sait pas diagonaliser exactement le hamiltonien et on doit utiliser des méthodes approchées : intégration numérique de l'équation de Schrödinger, méthode de perturbation ou autre méthode.

Dans cette section, nous allons exposer la méthode des perturbations indépendante du temps. Cette méthode consiste à utiliser comme point de départ un hamiltonien $H_0$ que l'on sait diagonaliser exactement, et que l'on perturbe en lui ajoutant un terme $W$ afin d'obtenir le hamiltonien "exact" $H = H_0 + W$, dans le cadre d'un domaine d'approximation prédéfini : *cf.* la section 4.3. On écrira

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda W \tag{15.1}$$

où l'on a introduit un paramètre réel $\lambda$ tel que $H = H_0$ si $\lambda = 0$ et $H = H_0 + W$ si $\lambda = 1$. Si $\lambda \to 0$, on peut espérer que la perturbation $\lambda W$ est en un certain sens[1] "petite" par rapport à $H_0$. Il peut arriver que l'on puisse effectivement faire varier $\lambda$. Par exemple, si $\lambda W$ correspond à l'interaction d'un système atomique avec un champ électromagnétique extérieur, on peut modifier à volonté la valeur de ce champ extérieur et donc $\lambda$ : $\lambda \to 0$ si le champ s'annule. Mais, en général, la perturbation est fixée par des données physiques avec lesquelles on ne peut pas jouer. Dans ce cas, $\lambda$ est un paramètre fictif que l'on fait varier de façon artificielle, en lui donnant à la fin des calculs sa valeur physique $\lambda = 1$. Nous avons déjà eu recours à cet artifice dans l'exposé de la théorie des perturbations dépendant du temps au § 8.5.3, en écrivant la perturbation sous la forme $\lambda W(t)$ et en rétablissant $\lambda = 1$ à la fin du calcul.

Nous supposons donc connu le spectre de $H_0$. Soit $E_0^{(n)}$ ses valeurs propres et $|n, r\rangle$ ses vecteurs propres, $r$ étant un indice de dégénérescence comme au § 2.3.1

$$H_0|n, r\rangle = E_0^{(n)}|n, r\rangle \tag{15.2}$$

Nous cherchons les valeurs propres et vecteurs propres de $H(\lambda)$ sous la forme d'un développement en puissances de $\lambda$, appelé *développement perturbatif*. Si $H(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle$, nous écrivons les développements du vecteur propre $|\varphi(\lambda)\rangle$ et de l'énergie $E(\lambda)$

$$|\varphi(\lambda)\rangle = |\varphi_0\rangle + \lambda|\varphi_1\rangle + \lambda^2|\varphi_2\rangle + \cdots \tag{15.3}$$

$$E(\lambda) = E_0^{(n)} + \lambda E_1^{(n)} + \lambda^2 E_2^{(n)} + \cdots \tag{15.4}$$

Si $\lambda = 0$, $|\varphi(\lambda = 0)\rangle \equiv |\varphi_0\rangle = |n, r\rangle$ et $E = E_0^{(n)}$. Notre hypothèse implicite est qu'un développement en $\lambda$ existe avec un rayon de convergence non nul, ou, en d'autre termes, que l'énergie est une fonction analytique de $\lambda$ au point $\lambda = 0$. Il est nécessaire de distinguer deux cas.

- La valeur propre $E_0^{(n)}$ de $H_0$ est simple, et on parle alors de théorie des perturbations non dégénérée.
- La valeur propre $E_0^{(n)}$ de $H_0$ est dégénérée avec une dégénérescence $N$, et on parle alors de théorie des perturbations dégénérée.

Nous allons traiter successivement ces deux cas, sans entrer dans les détails de la méthode générale du calcul à tous les ordres en $\lambda$. Nous nous contenterons

---

1. Définir rigoureusement qu'un opérateur est "petit" par rapport à un autre est un problème mathématique des plus complexes.

de l'ordre non trivial le plus bas en $\lambda$, en renvoyant aux ouvrages classiques pour le cas général.

### 15.1.2 Cas d'une valeur propre simple de $H_0$

Nous partons de $H_0|n\rangle = E_0^{(n)}|n\rangle$ et posons $|\varphi_0\rangle = |n\rangle$ avec $\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$, ainsi que $E_0 = E_0^{(n)}$ afin d'alléger les notations. En pratique, nous nous intéressons au développement perturbatif (15.4) de l'énergie et le développement perturbatif (15.3) du vecteur $|\varphi(\lambda)\rangle$ est un auxiliaire de calcul, ce qui nous permet de fixer $|\varphi(\lambda)\rangle$ par une condition commode : $\langle\varphi_0|\varphi(\lambda)\rangle = \langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$. Avec cette condition, $|\varphi(\lambda)\rangle$ n'est pas en général de norme unité, mais il est toujours possible de le normaliser si nécessaire. Nous avons, à l'ordre $\lambda$ inclus, d'une part

$$H(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle = H_0|\varphi_0\rangle + \lambda W|\varphi_0\rangle + \lambda H_0|\varphi_1\rangle$$

et d'autre part,

$$H(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle = (E_0 + \lambda E_1)|\varphi(\lambda)\rangle = E_0|\varphi_0\rangle + \lambda E_1|\varphi_0\rangle + \lambda E_0|\varphi_1\rangle$$

d'où, en identifiant les termes d'ordre $\lambda$,

$$W|\varphi_0\rangle + H_0|\varphi_1\rangle = E_1|\varphi_0\rangle + E_0|\varphi_1\rangle$$

Multipliant à gauche les deux membres de cette équation par le bra $\langle\varphi_0|$ et tenant compte de $\langle\varphi_0|H_0 = \langle\varphi_0|E_0$, nous obtenons[2]

$$E_1 = \langle\varphi_0|W|\varphi_0\rangle \tag{15.5}$$

ce que l'on peut écrire, en appelant $\Delta E_1$ la différence d'énergie entre le cas $\lambda \neq 0$ et le cas $\lambda = 0$ au premier ordre en $\lambda$

$$\boxed{\Delta E_1 = \lambda\langle\varphi_0|W|\varphi_0\rangle} \tag{15.6}$$

Le terme en $\lambda^2$ n'est pas très difficile à obtenir (exercice 15.6.1)

$$\boxed{\Delta E_2^{(n)} = \lambda^2 \sum_{k\neq n} \frac{|\langle k|W|n\rangle|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(k)}}} \tag{15.7}$$

Comme application, calculons le déplacement des niveaux de l'oscillateur harmonique à une dimension sous l'influence d'une perturbation anharmonique en $q^4$

$$\lambda W = \lambda \frac{m^2\omega^3}{\hbar}\, Q^4 \tag{15.8}$$

2. La formule (15.5) s'obtient immédiatement à partir du théorème de Feynman-Hellmann, exercice 4.4.3, équation (4.49).

Utilisant un résultat de l'exercice 10.4.1, on déduit de (15.6) le déplacement du niveau $n$ à l'ordre $\lambda$

$$\Delta E_1^{(n)} = \frac{3}{4}\,\lambda\hbar\omega\left(2n^2+2n+1\right) \tag{15.9}$$

Même si $\lambda$ est petit, le résultat diverge pour les grandes valeurs de $n$, car plus $n$ est grand, et plus la fonction d'onde est importante aux grandes valeurs de $q$, et donc plus l'effet de la perturbation en $q^4$ se fait sentir : la perturbation en $\lambda Q^4$ n'est jamais “petite”. Nous avons pris comme hypothèse de départ l'existence d'un développement en puissances de $\lambda$ avec un rayon de convergence non nul. En pratique, cette hypothèse d'analyticité à $\lambda = 0$ n'est pas toujours vérifiée, et l'oscillateur anharmonique que nous venons d'examiner en fournit un exemple. En effet, il est facile de comprendre que $E^{(n)}$ ne peut pas être analytique à $\lambda = 0$, car le hamiltonien change brutalement de nature en ce point. Pour $\lambda > 0$, il est borné inférieurement et les états liés sont présents, mais pour $\lambda < 0$ il n'est plus borné inférieurement et les états liés disparaissent ! Le développement n'a plus de sens pour $\lambda < 0$. En fait, le développement perturbatif est dans ce cas un développement asymptotique, qui donne de bons résultats pour $\lambda > 0$ si l'on garde un nombre de termes suffisamment petit, mais qui diverge si on essaie de le pousser trop loin. Ce type de développement est bien connu en mathématiques : un bon exemple en est la formule de Stirling valable pour $n \gg 1$

$$\Gamma(n+1) = n! = \left(\frac{n}{\mathrm{e}}\right)^n \sqrt{2\pi n}\,\left(1+\frac{1}{12n}+\frac{1}{288n^2}+\ldots\right) \tag{15.10}$$

qui est un développement asymptotique, non convergent, en puissances de $1/n$. Il existe des méthodes sophistiquées pour sommer ces développements asymptotiques[3].

### 15.1.3 Cas d'un niveau dégénéré

Nous passons maintenant au cas d'un niveau dégénéré, en appelant $\mathcal{H}^{(n)}$ le sous-espace de dimension $N$ de la valeur propre $E_0^{(n)}$ ; le projecteur $\mathcal{P}^{(n)}$ sur $\mathcal{H}^{(n)}$ s'écrit

$$\mathcal{P}^{(n)} = \sum_{r=1}^{N} |n,r\rangle\langle n,r| \tag{15.11}$$

Dans le sous-espace $\mathcal{H}^{(n)}$, l'opérateur $W$ est représenté par une matrice $N \times N$ d'éléments $W_{sr}^{(n)} = \langle n,s|W|n,r\rangle$ que l'on peut diagonaliser.

3. Voir par exemple Zinn-Justin [1989], chapitre 37.

Les vecteurs propres $|\varphi_0^{(n,q)}\rangle$ de $W$ dans $\mathcal{H}^{(n)}$ sont des combinaisons linéaires des $|n,r\rangle$

$$|\varphi_0^{(n,q)}\rangle = \sum_{r=1}^{N} c_{qr}|n,r\rangle$$

$$W|\varphi_0^{(n,q)}\rangle = E_1^{(n,q)}|\varphi_0^{(n,q)}\rangle$$

Les coefficients $c_{qr}$ sont d'ordre zéro en $\lambda$, puisque l'on a diagonalisé $W$ sans toucher à la diagonalisation de $H_0$, qui est un multiple de l'identité dans $\mathcal{H}^{(n)}$

$$H_0|\varphi_0^{(n,q)}\rangle = E_0^{(n)}|\varphi_0^{(n,q)}\rangle$$

La diagonalisation de $W$ dans $\mathcal{H}^{(n)}$ donne le résultat correct pour l'énergie à l'ordre $\lambda$. On retrouve les résultats du cas non-dégénéré en prenant la dimension de $\mathcal{H}^{(n)}$ égale à un. En résumé, à l'ordre $\lambda$, on calcule les niveaux d'énergie et les vecteurs propres comme pour un sytème à un nombre fini $N$ de niveaux, en diagonalisant la matrice représentative de $H_0 + \lambda W$ dans $\mathcal{H}^{(n)}$. En fait, l'approximation par un système à nombre fini de niveaux est souvent obtenue en négligeant les interactions entre sous-espaces $\mathcal{H}^{(n)}$. Remarquons enfin que les cas quasi-dégénérés sont aussi traités par cette méthode : un exemple en est donné au § 17.2.3.

### 15.1.4 Méthode variationnelle

Nous nous limitons à nouveau à l'étude d'un cas simple, la recherche de l'énergie de l'état fondamental, en renvoyant aux traités classiques pour l'application de la méthode variationnelle à d'autres cas. Soit $E_0$ l'énergie de l'état fondamental d'un hamiltonien $H$, $|0\rangle$ le vecteur propre correspondant

$$H|0\rangle = E_0|0\rangle$$

et $|\varphi\rangle$ un vecteur arbitraire unitaire de l'espace de Hilbert des états. Écrivons la valeur moyenne de $H$ dans l'état $|\varphi\rangle$ en décomposant $|\varphi\rangle$ sur la base des états propres $|n\rangle$ de $H$, $H|n\rangle = E_n|n\rangle$,

$$\langle\varphi|H|\varphi\rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle m|H|n\rangle = \sum_n E_n|c_n|^2$$

On en déduit

$$\langle\varphi|H|\varphi\rangle - \langle 0|H|0\rangle = \sum_n (E_n - E_0)|c_n|^2 \geq 0 \qquad (15.12)$$

où nous avons utilisé $\sum_n |c_n|^2 = 1$ et $E_n \geq E_0$. La méthode variationnelle consiste à se donner un vecteur d'essai $|\varphi(\alpha)\rangle$ dépendant d'un paramètre $\alpha$, ou de plusieurs paramètres $\alpha_i$, que l'on essaie de choisir aussi proche que possible de la forme supposée de $|0\rangle$. Le résultat (15.12) montre que

$$\langle H\rangle(\alpha) = \langle\varphi(\alpha)|H|\varphi(\alpha)\rangle \geq E_0$$

Dans le cadre de la paramétrisation choisie, le meilleur résultat pour $E_0$ sera obtenu en cherchant le minimum de $\langle H\rangle(\alpha)$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\,\langle H\rangle(\alpha)\Big|_{\alpha=\alpha_0} = 0 \tag{15.13}$$

et une borne supérieure sur $E_0$ est

$$E_0 \le \langle\varphi(\alpha_0)|H|\varphi(\alpha_0)\rangle \tag{15.14}$$

Pour comparer deux choix différents $|\varphi(\alpha)$ et $|\tilde{\varphi}(\beta)\rangle$, on compare les deux minima et le meilleur choix est celui qui donne la valeur minimale de $\langle H\rangle$. Il est immédiat de généraliser à un vecteur dépendant de plusieurs paramètres $\alpha_1,\ldots,\alpha_p$ : on cherche le minimum de $\langle H\rangle$ par

$$\frac{\partial}{\partial\alpha_i}\,\langle H\rangle(\alpha_1,\ldots\alpha_p)\Big|_{\alpha_j=\alpha_{j0}} = 0$$

À titre d'exemple, examinons le calcul variationnel de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique, en choisissant comme fonction d'onde d'essai une fonction normalisable de norme unité

$$\langle x|\varphi(\alpha)\rangle = \varphi_\alpha(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\alpha^{3/2}\,\frac{1}{x^2+\alpha^2} \tag{15.15}$$

Les intégrales nécessaires aux calculs ci-dessous se déduisent de

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{x^2+\alpha^2} = \frac{\pi}{\alpha} \tag{15.16}$$

en différentiant $I(\alpha)$ par rapport à $\alpha^2$. Partant de la forme (10.9) du hamiltonien de l'oscillateur harmonique, on calcule $\langle H\rangle(\alpha)$

$$\begin{aligned}\langle H\rangle(\alpha) &= \frac{1}{2}\,\hbar\omega\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\left[\left(\frac{\mathrm{d}\varphi_\alpha}{\mathrm{d}x}\right)^2 + x^2\varphi_\alpha^2(x)\right]\\ &= \frac{1}{2}\,\hbar\omega\left[\frac{1}{2\alpha^2}+\alpha^2\right]\end{aligned}$$

Le premier terme du crochet est l'énergie cinétique et le second l'énergie potentielle. $\langle H\rangle(\alpha)$ est minimum pour $\alpha^2=\alpha_0^2=1/\sqrt{2}$ et

$$\langle H\rangle(\alpha_0) = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} > E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Pour $\alpha=\alpha_0$, l'énergie cinétique moyenne et l'énergie potentielle moyenne sont égales

$$\frac{1}{2m}\,\langle P^2\rangle = \frac{1}{2}\,m\omega^2\langle X^2\rangle = \frac{\hbar\omega}{2\sqrt{2}}$$

Le choix (15.15) de la fonction d'onde d'essai n'est pas excellent (l'erreur sur l'énergie est $\sim 40$ % !), car la décroissance à l'infini de cette fonction d'onde est beaucoup trop lente. Avec une fonction d'onde d'essai gaussienne, on trouverait bien sûr le résultat exact $\hbar\omega/2$. Un exemple important d'application de la méthode variationnelle sera donné au § 16.1.1 : le calcul de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hélium.

## 15.2 Atomes à un électron

### 15.2.1 Niveaux d'énergie en l'absence de spin

Au chapitre 9, nous avons étudié le spectre de l'atome d'hydrogène, atome à un seul électron ; une généralisation immédiate est donnée par les ions $He^+$, $Li^{++}$, etc. Lorsque le nombre d'électrons est différent de un, il n'existe plus de solution analytique au calcul des niveaux d'énergie. On a recours à des méthodes d'approximation, qui peuvent être très précises dans le cas des atomes légers et en particulier de l'hélium. Un autre cas où l'on peut utiliser une approximation simple est celui des alcalins. En effet, en première approximation, un alcalin est un atome où un électron externe est soumis à un potentiel effectif créé par le noyau atomique et les $(Z-1)$ autres électrons, appelés électrons des couches internes. Le spectre est alors semblable à celui de l'atome d'hydrogène, avec la différence que l'on n'observe pas de dégénérescence entre des niveaux de moment angulaire orbital différent car le potentiel effectif n'est pas en $1/r$ : dans le cas du sodium, par exemple, le niveau fondamental est un niveau $3s$ et le niveau $3p$ est intermédiaire entre les niveaux $3s$ et $4s$ (figure 9.7).

Les spectres des figures 9.6 et 9.7 sont obtenus en négligeant le spin de l'électron externe ainsi que le spin du noyau atomique. Nous allons traiter successivement les deux modifications introduites par la prise en compte de ces spins : la *structure fine* induite par l'interaction entre le moment angulaire de l'électron et son spin, et la *structure hyperfine* induite par l'interaction du spin nucléaire avec le spin et le moment angulaire orbital de l'électron.

### 15.2.2 Structure fine

La structure fine est un effet d'origine relativiste dont l'expression correcte s'obtient à partir d'une équation d'onde quantique et relativiste valable pour les particules de spin 1/2, l'équation de Dirac[4] que nous étudierons au chapitre 19. Dans le cadre d'une description classique, nous allons donner un argument intuitif, mais qui n'est pas entièrement correct, pour justifier

4. L'équation de Dirac n'est pas la seule équation d'onde quantique et relativiste : une autre équation relativiste importante est l'équation de Klein-Gordon qui décrit les particules de spin zéro. Toutefois, aucune de ces deux équations n'est entièrement cohérente : le mariage de la mécanique quantique et de la relativité exige une théorie des champs quantifiés.

l'expression du hamiltonien de la structure fine. Dans le référentiel où le noyau est au repos, ou référentiel du noyau, le champ électromagnétique est le gradient du potentiel électrostatique $V(r)/q_e$ créé par le noyau et les $(Z-1)$ électrons des couches internes, et l'électron externe se déplace à une vitesse $\vec{v}$ dans ce référentiel. Dans le référentiel où il est au repos, l'électron voit le noyau se déplacer avec une vitesse $-\vec{v}$, et compte tenu des lois de transformation du champ électromagnétique dans un changement de référentiel d'inertie, cet électron voit non seulement un champ électrique, mais aussi un champ magnétique donné en fonction du champ électrostatique $\vec{E}$ dans le référentiel du noyau par[5]

$$\vec{B} \simeq -\frac{1}{c^2}\,\vec{v}\times\vec{E} \simeq \frac{1}{q_e c^2}\left[\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\right]\left(\frac{\vec{p}}{m_e}\times\vec{r}\right) \tag{15.17}$$

Ce champ magnétique interagit avec le moment magnétique $\vec{\mu}=\gamma\vec{s}$ de l'électron externe en donnant une énergie d'interaction

$$W_{\mathrm{so}} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} \simeq -\frac{q_e}{m_e}\,\vec{s}\cdot\vec{B} \tag{15.18}$$

car le facteur gyromagnétique $\gamma \simeq q_e/m_e$. Combinant ces deux équations et introduisant le moment angulaire orbital $\vec{l}=\vec{r}\times\vec{p}$, on en déduit le potentiel spin-orbite

$$W_{\mathrm{so}} = \frac{1}{m_e^2 c^2}\left[\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\right]\vec{l}\cdot\vec{s} \tag{15.19}$$

Toutefois, notre démonstration est critiquable car nous avons utilisé les formules de transformation entre référentiels d'inertie. Or, le référentiel de l'électron est un référentiel accéléré par rapport à celui du noyau puisque l'électron tourne autour du noyau. La prise en compte de ce mouvement de rotation se traduit par un phénomène de précession du spin, la précession de Thomas[6] (exercice 19.6.3), qui réduit d'un facteur deux le résultat (15.19). En fin de compte, l'expression quantique correcte du potentiel spin-orbite s'obtient en corrigeant (15.19) par un facteur 1/2 et en remplaçant les quantités classiques $\vec{l}$ et $\vec{s}$ par les opérateurs $\vec{L}$ et $\vec{S}$

$$\boxed{W_{\mathrm{so}} = \frac{1}{2m_e^2 c^2}\left[\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\right]\vec{L}\cdot\vec{S}} \tag{15.20}$$

Évaluons l'ordre de grandeur de la correction aux niveaux d'énergie pour l'atome d'hydrogène ; comme $\vec{L}$ et $\vec{S}$ sont d'ordre $\hbar$ et que $V(r) = -e^2/r$,

5. Dans l'expression (15.17), on a utilisé l'approximation $v \ll c$ : la formule exacte contient un facteur $(1-v^2/c^2)^{-1/2}$.

6. Comme le "paradoxe" des jumeaux de Langevin, auquel elle est d'ailleurs reliée, la précession de Thomas est un phénomène de relativité restreinte, et non de relativité générale, bien que dans les deux cas, on utilise des référentiels accélérés.

nous obtenons dans un état $n$

$$\langle W_{\rm so}\rangle \sim \frac{\hbar^2 e^2}{2m_e^2c^2}\Big\langle\frac{1}{r^3}\Big\rangle \sim \frac{\hbar^2 e^2}{2m_e^2c^2n^3a_0^3} = \left(\frac{e^2}{2a_0}\right)\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\frac{1}{n^3} = \frac{\alpha^2 R_\infty}{n^3}$$

où nous avons introduit le rayon de Bohr $a_0$, la constante de structure fine $\alpha$ et la constante de Rydberg $R_\infty$ : voir (1.46)–(1.48). Les corrections aux niveaux d'énergie sont donc de l'ordre de $\alpha^2$ en valeur relative, ce à quoi on s'attend pour des corrections relativistes, car[7] $(v/c)^2 \sim \alpha^2$.

Examinons l'effet du potentiel (15.20) sur un niveau $(nl)$, de nombre quantique principal $n$ et de moment angulaire orbital $l$. Comme l'effet sur les niveaux est faible, $\sim \alpha^2$, on pourra utiliser la théorie des perturbations. Ni le moment angulaire orbital $\vec{L}$, ni le spin $\vec{S}$ ne commutent avec $W_{\rm so}$. En revanche, l'opérateur scalaire $\vec{L}\cdot\vec{S}$ commute avec le moment angulaire *total* $\vec{J} = \vec{L}+\vec{S}$ et de plus, comme $[\vec{L}^{\,2},\vec{L}] = 0$ et $[\vec{L}^{\,2}, f(r)] = 0$, le potentiel (15.20) commute avec $\vec{L}^{\,2}$, ce qui entraîne qu'il ne relie pas des niveaux de $l$ différent. En résumé, le potentiel spin-orbite est diagonal dans une base $|l\,1/2\,jm_j\rangle$. En l'absence du potentiel spin-orbite, la dégénérescence du niveau $(nl)$ est $2(2l+1)$ et il faudrait en principe appliquer la théorie des perturbations d'un niveau dégénéré. Mais dans le cas présent la situation est très simple, car on connaît déjà la base $|l\,1/2\,jm_j\rangle$ où $W_{\rm so}$ est diagonal. Le potentiel spin-orbite va partiellement lever la dégénérescence. En effet, deux valeurs $j = l \pm 1/2$ du moment angulaire total sont possibles, et d'après (9.138), en utilisant $\vec{J}^{\,2} = (\vec{L}+\vec{S})^2$

$$\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{\hbar^2}{2}\big[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\big] \tag{15.21}$$

soit

$$\begin{aligned} \vec{L}\cdot\vec{S} &= -\frac{\hbar^2}{2}(l+1) \qquad & j = l-\frac{1}{2} \\ \vec{L}\cdot\vec{S} &= +\frac{\hbar^2}{2}\,l \qquad & j = l+\frac{1}{2} \end{aligned} \tag{15.22}$$

Les états de moment angulaire total $j = l-1/2$ et $j = l+1/2$ ont donc des énergies différentes et le potentiel spin-orbite lève partiellement la dégénérescence. Naturellement, chacun des deux niveaux d'énergie correspondants possède encore une dégénérescence $(2j+1)$. Notons que le potentiel spin-orbite n'affecte pas les ondes $s$ $(l=0)$.

Comme cas particulier, examinons le niveau $2p$ $(l=1)$ de l'hydrogène. Les deux valeurs possibles de $j$ sont $j = 1/2$ et $j = 3/2$. Les niveaux correspondants sont notés $2p_{1/2}$ et $2p_{3/2}$. La transition $2p \to 1s$ est dédoublée, ce qui est facilement confirmé en spectroscopie. Dans le cas de l'hydrogène, les niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ restent confondus à l'approximation de l'équation de

---

7. Pour un noyau de charge $Z$ et un électron unique $(v/c)^2 \sim (Z\alpha)^2$.

Dirac. La différence d'énergie avec le niveau $2p_{3/2}$ est $\simeq 4.5 \times 10^{-5}$ eV, ce qui correspond à environ 10 GHz en fréquence. Le calcul d'ordre de grandeur précédent donne pour cette différence d'énergie $\sim \alpha^2 R_\infty/8 \sim 10^{-4}$ eV, en accord qualitatif avec l'expérience. Cependant, l'expérience montre que, contrairement à la prédiction de l'équation de Dirac, les niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ ne sont pas confondus : le niveau $2p_{1/2}$ est plus bas de $\simeq 5 \times 10^{-5}$ eV, ce qui correspond à environ 1 GHz. Cette différence, appelée déplacement Lamb, s'explique par des effets d'électrodynamique quantique, la théorie quantifiée du champ électromagnétique et du champ électron-positron.

La notation précédente $(nl)_j$ se généralise aux niveaux plus élevés : pour une onde $d$ ($l = 2$), les valeurs possibles de $j$ sont 3/2 et 5/2 et les niveaux sont notés $nd_{3/2}$, $nd_{5/2}$. Pour une onde $f$ ($l = 3$), on aura des niveaux $nf_{5/2}$ et $nf_{7/2}$, etc. Un exemple classique de spectroscopie est le dédoublement de la raie jaune du sodium, qui correspond à une transition $3p \to 3s$ : les deux raies sont notées $D_1$ à 589.6 nm et $D_2$ à 589.0 nm. En général, le niveau $j = l+1/2$ est plus élevé que le niveau $j = l - 1/2$ car la valeur moyenne $\langle \mathrm{d}V/\mathrm{d}r\rangle > 0$, mais il y a quelques exceptions. Dans le modèle en couches du noyau, où le potentiel spin-orbite joue un rôle crucial, cet ordre est systématiquement inversé (exercice 16.4.4).

### 15.2.3 Effet Zeeman

La dégénérescence $(2j + 1)$ du niveau $(nl)_j$ est levée en plongeant l'atome dans un champ magnétique constant $\vec{B}$ : c'est *l'effet Zeeman*. Cet effet provient de l'interaction du champ magnétique avec le moment magnétique orbital dû au mouvement de l'électron sur son orbite, et également avec le moment magnétique associé au spin de cet électron. Le moment magnétique associé à $\vec{L}$ est donné par le facteur gyromagnétique classique (3.30) $\gamma = q_e/(2m_e)$, tandis que le facteur gyromagnétique du spin est $\simeq q_e/m_e$. L'énergie d'interaction se déduit du couplage d'un moment magnétique avec le champ[8]

$$\boxed{W = -\frac{q_e}{2m_e}\,(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B}} \tag{15.23}$$

On choisit habituellement $\vec{B}$ parallèle à $Oz$

$$W = -\frac{q_e B}{2m_e}\,(L_z + 2S_z) \tag{15.24}$$

Lorsque l'énergie Zeeman (15.23) est suffisamment petite par rapport à l'énergie caractéristique de la structure fine du niveau considéré, on peut utiliser la théorie des perturbations non dégénérée dans chaque niveau $(nl)_j$. Si tel n'est pas le cas, il faut diagonaliser simultanément le hamiltonien de la structure

8. Toutefois, cet argument ne donne que le terme dominant de l'interaction : voir l'exercice 15.4.5 pour une justification détaillée de (15.23).

fine et celui de l'effet Zeeman : exercice 11.6.2. Nous nous plaçons dans le cas où l'effet Zeeman est petit. Les éléments de matrice de la perturbation dans le niveau $(nl)_j$ de (15.24) sont

$$W^{nlj}_{mm'} = -\frac{q_e B}{2m_e} \langle nljm|L_z + 2S_z|nljm'\rangle \tag{15.25}$$

Les opérateurs $\vec{L}$ et $\vec{S}$ sont des opérateurs vectoriels, et d'après le théorème de Wigner-Eckart (9.150) pour ces opérateurs, les éléments de matrice sont donnés, par exemple pour $L_z$, par

$$\begin{aligned}\langle nljm|L_z|nljm'\rangle &= \frac{1}{\hbar^2 j(j+1)}\langle j||(\vec{J}\cdot\vec{L})||j\rangle\langle nljm|J_z|nljm'\rangle \\ &= \frac{m}{\hbar j(j+1)}\,\langle(\vec{J}\cdot\vec{L})\rangle\;\delta_{mm'}\end{aligned}$$

Utilisant

$$\vec{S}^2 = (\vec{J}-\vec{L})^2 \quad \text{et} \quad \vec{L}^2 = (\vec{J}-\vec{S})^2$$

pour exprimer $\vec{J}\cdot\vec{S}$ et $\vec{J}\cdot\vec{L}$, on obtient

$$\langle\vec{J}\cdot(\vec{L}+2\vec{S})\rangle = \frac{3}{2}\,\vec{J}^{\,2} + \frac{1}{2}\,\vec{S}^2 - \frac{1}{2}\,\vec{L}^2$$

et on en déduit

$$\begin{aligned}\langle nljm|L_z + 2S_z|nljm'\rangle &= \frac{m\hbar}{2j(j+1)}\left[3j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1)\right]\delta_{mm'} \\ &= m\hbar\left[1 + \frac{1}{2j(j+1)}\left(j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1)\right)\right]\delta_{mm'}\end{aligned}$$

Le résultat final s'écrit sous la forme

$$\boxed{W^{nlj}_{mm'} = -g\,\frac{q_e B}{2m_e}\,m\hbar\delta_{mm'}} \tag{15.26}$$

Dans le cadre de notre approximation, les déplacements des sous-niveaux Zeeman sont linéaires en $B$. Ils sont contrôlés par le *facteur de Landé* $g$

$$\boxed{g = 1 + \frac{1}{2j(j+1)}\left[j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1)\right]} \tag{15.27}$$

On interprète physiquement $gq_e/(2m_e)$ comme un facteur gyromagnétique effectif. Pour un électron libre dans un champ magnétique, nous avons vu que le facteur de Landé était égal à 2 ; c'est aussi le cas pour une onde $s$, ainsi qu'on peut le vérifier en posant $l = 0$ dans (15.27).

### 15.2.4 Structure hyperfine

Un effet encore plus fin, de l'ordre de $10^{-6}$ en valeur relative, est dû à l'interaction du moment magnétique du noyau atomique avec le moment magnétique orbital et le moment magnétique associé au spin de l'électron externe. L'interaction entre un dipôle magnétique nucléaire et un dipôle magnétique électronique est *a priori* plus faible que l'interaction entre deux dipôles électroniques par un facteur $\sim 10^{-3}$ : en effet, le magnéton de Bohr nucléaire $\mu_N = q_p\hbar/(2m_p)$ est plus petit que le magnéton de Bohr $\mu_B = |q_e|\hbar/(2m_e)$ par un facteur $m_p/m_e \sim 2000$. Rappelons les expressions des opérateurs moments magnétiques de l'électron et du proton

$$\vec{\mu}_e = \gamma_e \vec{S}_e \simeq -2\mu_B \frac{\vec{S}_e}{\hbar} \qquad \mu_p = \gamma_p \vec{S}_p \simeq 5.59\mu_N \frac{\vec{S}_p}{\hbar} \tag{15.28}$$

On montre en électrodynamique classique[9] que le champ magnétique $\vec{B}(\vec{r})$ d'un dipôle ponctuel $\vec{\mu}_n$ à l'origine des coordonnées vaut

$$\vec{B}(\vec{r}) = -\frac{\mu_0}{4\pi r^3}\left[\vec{\mu}_n - 3(\vec{\mu}_n \cdot \hat{r})\hat{r}\right] + \frac{2\mu_0}{3}\vec{\mu}_n \delta(\vec{r}) \tag{15.29}$$

On peut écrire comme dans (15.23) l'énergie du moment magnétique orbital et du spin de l'électron externe dans ce champ magnétique. Nous allons nous limiter au cas où l'électron est dans une onde $s$, cas où seul est à prendre en compte le moment magnétique de spin : dans une onde $s$, il n'y a pas de contribution du moment angulaire orbital au moment magnétique de l'atome. De plus, le terme entre crochets dans (15.29) donne une contribution nulle. En effet, si l'on calcule en théorie des perturbations l'énergie magnétique $\langle W' \rangle = -\langle \vec{\mu}_e \cdot \vec{B} \rangle$ correspondant à l'interaction du moment magnétique électronique dû au spin en prenant en compte le terme entre crochets de (15.29), on trouve pour une onde $s$, dont la fonction d'onde $\varphi(r)$ dépend seulement de $r$

$$\begin{aligned}\langle W' \rangle &= \frac{\mu_0}{4\pi}\int \mathrm{d}^3r\, |\varphi(r)|^2 \frac{1}{r^3}\left[(\vec{\mu}_n \cdot \vec{\mu}_e) - 3(\vec{\mu}_n \cdot \hat{r})(\vec{\mu}_e \cdot \hat{r})\right] \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi}\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \left[(\vec{\mu}_n \cdot \vec{\mu}_e) - 3\sum_{i,j=1}^{3} \mu_{ni}\mu_{ej} I_{ij}\right]\end{aligned}$$

Pour obtenir la deuxième ligne de l'équation précédente, on a découplé la partie radiale de l'intégrale du second terme du crochet de sa partie angulaire en écrivant

$$\int \mathrm{d}^3r = 4\pi \int_0^\infty r^2\, \mathrm{d}r \int \frac{\mathrm{d}\Omega}{4\pi}$$

L'intégrale radiale donne

$$4\pi \int_0^\infty r^2\, \mathrm{d}r\, |\varphi(r)|^2 \frac{1}{r^3} = \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$$

9. Voir par exemple Jackson [2001], section 5.6.

L'intégrale angulaire $I_{ij}$ vaut

$$I_{ij} = \int \frac{\mathrm{d}\Omega}{4\pi}\, \hat{r}_i \hat{r}_j = \frac{1}{3}\, \delta_{ij}$$

Pour le montrer, on observe que le seul tenseur d'ordre deux invariant par rotation que l'on peut former avec les indices $(i, j)$ est $\delta_{ij}$

$$I_{ij} = c\, \delta_{ij} \quad \text{et} \quad \sum_{ij} \delta_{ij} I_{ij} = 1$$

ce qui montre que $c = 1/3$ et que les deux termes de $\langle W' \rangle$ se compensent. Il reste donc uniquement le terme dit de contact

$$\begin{aligned} W_{\text{contact}} &= -\frac{2\mu_0}{3}\, \vec{\mu}_n \cdot \vec{\mu}_e\, \delta(\vec{r}) \\ &= -\frac{2\mu_0}{3}\, \gamma_n \gamma_e (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_e)\, \delta(\vec{r}) \end{aligned} \tag{15.30}$$

Nous prendrons comme exemple de structure hyperfine celle de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène : $\mu_n \to \mu_p$, $n = 1$, $l = 0$. Le vecteur d'état est le produit tensoriel d'une fonction d'onde spatiale déduite de (9.94)

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \tag{15.31}$$

et d'une fonction d'onde de spin, produit tensoriel d'un vecteur d'état dans l'espace de spin de l'électron et dans celui du proton. La partie spatiale et la partie de spin sont entièrement découplées. On prend d'abord la moyenne pour la partie spatiale

$$\begin{aligned} \langle W_{\text{contact}} \rangle_{\text{spat}} &= -\frac{2\mu_0}{3}\, \gamma_n \gamma_e |\varphi(0)|^2 (\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e) \\ &= \frac{A}{\hbar^2}\, (\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e) \end{aligned} \tag{15.32}$$

La constante $A$ vaut

$$A = \frac{2\mu_0}{3}\, (2\mu_B)(5.59\mu_N) \frac{1}{\pi a_0^3} \simeq 5.87 \times 10^{-6}\, \text{eV}$$

Le hamiltonien effectif est donc $A(\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e)/\hbar^2$, qui agit dans l'espace de Hilbert à quatre dimensions produit tensoriel des deux espaces de spin. En l'absence de perturbation hyperfine, le niveau fondamental $1s_{1/2}$ de l'atome d'hydrogène possède une dégénérescence d'ordre 4. Il faut diagonaliser $A(\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e)/\hbar^2$ dans ce sous-espace, ce qui est immédiat si l'on introduit le spin total $\vec{S} = \vec{S}_p + \vec{S}_e$ et l'identité

$$\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e = \frac{1}{2} \left( \vec{S}^{\,2} - \vec{S}_p^2 - \vec{S}_e^2 \right) = \frac{\hbar^2}{2} \left[ s(s+1) - \frac{3}{2} \right] \tag{15.33}$$

Suivant les résultats du § 9.6.1, les deux valeurs possibles de $s$ sont $s = 1$ (état triplet) et $s = 0$ (état singulet). Les valeurs propres du hamiltonien sont

$$s = 1 \quad \text{état triplet} \qquad E_{\text{trip}} = E_0 + \frac{1}{4}A$$
$$s = 0 \quad \text{état singulet} \qquad E_{\text{sing}} = E_0 - \frac{3}{4}A$$

où $E_0$ est l'énergie en l'absence d'effet hyperfin, et les vecteur propres sont donnés par (9.125) et (9.126). Les deux niveaux sont distants de $A \simeq 5.87 \times 10^{-6}$ eV, ce qui correspond à l'émission d'un photon de longueur d'onde de 21 cm quand l'atome passe du niveau triplet au niveau singulet. Bien que la durée de vie du niveau triplet soit très longue : $10^7$ années, et qu'elle soit *a priori* difficile à observer, elle est d'une grande importance en astrophysique. Elle a donné des informations fondamentales[10] sur les nuages d'hydrogène atomique interstellaire qui consituent de 10 à 50 % de la masse de la galaxie, en permettant les mesures des distributions de masse, vitesses, champs magnétiques, etc.

# 15.3 Manipulation d'atomes par laser

## 15.3.1 Équations de Bloch optiques

On sait depuis longtemps que la lumière exerce des forces sur la matière, l'exemple le plus connu étant la pression de radiation. Cependant, lorsque la lumière provient de sources conventionnelles, ces forces sont très faibles, et c'est seulement depuis les années 1980 que l'utilisation des lasers a permis d'exercer des forces importantes sur un atome, forces qui peuvent aller jusqu'à $10^5$ fois la force de pesanteur ! Une application particulièrement intéressante est le *refroidissement laser*, dont nous donnerons un exemple élémentaire au § 15.3.3. Nous utiliserons le modèle de l'atome à deux niveaux : deux niveaux atomiques $E_a$ et $E_b$ ($E_b > E_a$) sont séparés de $E_b - E_a = \hbar\omega_0$. On supposera que $E_a$ est le niveau fondamental de l'atome, ou bien un niveau métastable dont la durée de vie est suffisamment longue pour ne pas intervenir dans la discussion. Cet atome est placé dans une onde électromagnétique créée par un laser dont le vecteur d'onde $\vec{k}$ est parallèle à $Oz$ et dont la fréquence $\omega$ est proche de la fréquence de résonance : $\omega \simeq \omega_0$. Comme au § 5.3.2, on appelle *désaccord* la différence $\delta = \omega - \omega_0$. Le champ électrique à la position de l'atome est de la forme

$$\vec{E} = \vec{e}_s E_0 \cos\omega t \tag{15.34}$$

10. Pour plus de détails, voir par exemple Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 13.

On ignore, pour le moment, les degrés de liberté de translation de l'atome, en le supposant infiniment lourd[11]. Dans ces conditions, le hamiltonien $H$ est donné par (5.54)

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar}{2}\,\omega_0 & -dE_0\cos\omega t \\ -dE_0\cos\omega t & \frac{\hbar}{2}\,\omega_0 \end{pmatrix} \tag{15.35}$$

Les lignes et les colonnes sont dans l'ordre $(a, b)$, le zéro d'énergie en l'absence de champ a été choisi à mi-chemin entre $E_a$ et $E_b$ et $d$ est l'élément de matrice $(\vec{D}\cdot\vec{e}_s)_{ab}$ de la composante suivant $\vec{e}_s$ de l'opérateur moment dipolaire électrique entre les deux niveaux. On introduit, comme au § 5.3.2, la fréquence de Rabi $\omega_1$

$$\omega_1 = -\frac{dE_0}{\hbar} \tag{15.36}$$

Le signe moins tient compte de la charge négative de l'électron, de sorte que $\omega_1 > 0$. Avec cette définition, on peut récrire $H$ en fonction des matrices de Pauli $\sigma_1$ et $\sigma_3$

$$\frac{1}{\hbar}\,H = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\,\omega_0 & \omega_1\cos\omega t \\ \omega_1\cos\omega t & \frac{1}{2}\,\omega_0 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\,\omega_0\sigma_3 + (\omega_1\cos\omega t)\sigma_1 = \vec{\sigma}\cdot\vec{a} \tag{15.37}$$

En général, l'état quantique de l'atome sera décrit par un opérateur statistique $\rho$. En effet, l'atome est en interaction permanente avec le champ électromagnétique quantifié, et même si l'ensemble champ+atome était dans un état pur, l'état de l'atome ne serait pas un état pur : comme nous l'avons vu au § 11.1.2, l'état de l'atome est décrit en prenant la trace partielle sur les variables du champ, et le résultat est un opérateur statistique, l'opérateur statistique réduit de l'atome, représenté par une matrice $2 \times 2$ agissant dans l'espace à deux dimensions de l'atome à deux niveaux, et non un vecteur de cet espace. Suivant le § 11.1.3, nous écrivons la matrice statistique en fonction d'un vecteur réel $\vec{b}$, le vecteur de Bloch, tel que $\vec{b}^2 \le 1$

$$\rho = \frac{1}{2}\left(I + \sum_{i=1}^{3}\sigma_i b_i\right) = \frac{1}{2}\left(I + \vec{\sigma}\cdot\vec{b}\right) \tag{15.38}$$

Suivant les notations usuelles, on appelle $(u, v, -w)$ les composantes du vecteur de Bloch : $u = b_1$, $v = b_2$ et $w = -b_3$. On peut aussi écrire $\rho$ sous forme matricielle explicite

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}(\rho_{bb} - \rho_{aa}) & \rho_{ab} \\ \rho_{ba} & \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(\rho_{bb} - \rho_{aa}) \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 - w & u - \mathrm{i}v \\ u + \mathrm{i}v & 1 + w \end{pmatrix} \tag{15.39}$$

11. Plus précisément, on traite classiquement les degrés de liberté de translation, ce qui suppose que l'on doit avoir $\hbar\Gamma \gg E_R$, où $\Gamma$ est la largeur de raie et $E_R$ l'énergie de recul définie en (15.68). On suppose aussi le milieu suffisamment dilué, afin de pouvoir négliger les collisions entre atomes.

Dans l'écriture de $\rho$, nous avons tenu compte de la condition $\rho_{aa} + \rho_{bb} = 1$. La quantité $w = \rho_{bb} - \rho_{aa}$ mesure la différence de population entre les niveaux $E_b$ et $E_a$ : si l'on dispose d'une collection de $\mathcal{N}$ atomes, en moyenne $\mathcal{N}\rho_{aa}$ seront dans l'état $E_a$ et $\mathcal{N}\rho_{bb}$ dans l'état $E_b$. Les éléments de matrice non diagonaux $\rho_{ab} = \rho_{ba}^*$ sont les cohérences. La présence de cohérences non nulles, c'est-à-dire de phases, est bien sûr le signal d'effets quantiques.

L'équation d'évolution de $\rho$ est donnée par (11.33)

$$\dot{\rho} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\,[\,H, \rho] \tag{15.40}$$

Le commutateur dans (15.40) se calcule aisément en utilisant (3.52)

$$[\vec{\sigma} \cdot \vec{a}, \vec{\sigma} \cdot \vec{b}] = 2\mathrm{i}\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

On obtient

$$\begin{aligned} \dot{u} &= \omega_0 v \\ \dot{v} &= -\omega_0 u + 2\omega_1 w \cos \omega t \\ \dot{w} &= -2\omega_1 v \cos \omega t \end{aligned} \tag{15.41}$$

Il sera commode, afin de compléter ces équations et de justifier une approximation ultérieure, de les récrire en fonction de la cohérence $r = \rho_{ab} = (u - \mathrm{i}v)/2$

$$\dot{w} = -2\mathrm{i}\omega_1(r - r^*) \cos \omega t \tag{15.42}$$

$$\dot{r} = \mathrm{i}\omega_0 r - \mathrm{i}\omega_1 w \cos \omega t \tag{15.43}$$

Ces équations d'évolution de la matrice statistique sont hamiltoniennes, c'est-à-dire régies par une loi du type (15.40) dépendant d'un hamiltonien ; on dit aussi que évolution est unitaire (ou hamiltonienne), car (15.40) est équivalent à

$$\rho(t) = U(t, 0)\rho(t = 0)U^\dagger(t, 0)$$

où $U(t)$ est l'opérateur unitaire d'évolution (4.14). Cependant, ces équations sont en fait incomplètes : l'interaction de l'atome avec son environnement conduit à des équations qui ne sont pas de la forme (15.40), et donc à une évolution non hamiltonienne. C'est l'ensemble atome+environnement qui obéit à une évolution unitaire, et si l'on s'intéresse seulement aux degrés de liberté de l'atome, l'évolution n'est plus hamiltonienne : l'atome est un système quantique ouvert. Ce type d'évolution a déjà été rencontré dans la section 11.4, et il sera traité en toute généralité au chapitre 18. Nous allons nous limiter au cas où l'environnement de l'atome est uniquement le champ électromagnétique, ce qui est une excellente approximation pour des atomes piégés par des lasers qui forment un milieu dilué, mais il pourrait y avoir d'autres sources d'évolutions non hamiltoniennes, comme des collisions avec d'autres atomes dans

un milieu dense[12]. Le calcul fondé sur (15.40) tient compte de l'interaction avec le champ laser, et donc de l'absorption et de l'émission induites, mais non de l'interaction avec le champ quantifié : il néglige l'émission spontanée. En raison de l'émission spontanée, l'atome dans le niveau $E_b$ tend à revenir dans le niveau $E_a$ en émettant un photon avec une probabilité $\Gamma$ par unité de temps (*cf.* le § 11.4.3). L'équation différentielle donnant $\dot{\rho}_{bb}$ doit donc inclure dans son second membre un terme $-\Gamma\rho_{bb}$, qui conduirait, en l'absence de champ laser, à une décroissance exponentielle de la population du niveau $E_b$ en $\exp(-\Gamma t)$. On en déduit que le membre de droite de l'équation différentielle pour $w$ contient un terme en $-\Gamma(w+1)$. Les cohérences doivent également décroître car, en l'absence de champ laser, l'atome revient dans son niveau fondamental $E_a$ pour $t \gg \tau = 1/\Gamma$, et la matrice statistique a pour seul élément non nul $\rho_{aa} = 1$. Nous avons montré au § 11.4.3 que le taux de décroissance des cohérences est, dans le cadre de nos approximations, égal à $\Gamma/2$. Les équations (15.42) et (15.43) deviennent donc

$$\dot{w} = -2\mathrm{i}\omega_1(r - r^*)\cos\omega t - \Gamma(w+1) \tag{15.44}$$

$$\dot{r} = \mathrm{i}\omega_0 r - \mathrm{i}\omega_1 w \cos\omega t - \frac{\Gamma}{2}\, r \tag{15.45}$$

Nous allons transformer ces équations en utilisant comme au § 5.3.2 l'approximation séculaire. On remarque que si $\omega_1 \ll \omega_0$, l'équation (15.45) implique que $r \sim \exp(\mathrm{i}\omega_0 t)$ alors que $w$ est lentement variable. Écrivant $\cos\omega t$ sous forme d'exponentielles complexes et négligeant les termes rapidement variables en $\exp(\pm\mathrm{i}(\omega+\omega_0)t)$, les équations (15.44)–(15.45) deviennent

$$\dot{w} = -\mathrm{i}\omega_1(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\, r - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\, r^*) - \Gamma(w+1) \tag{15.46}$$

$$\dot{r} = \mathrm{i}\omega_0 r - \frac{\mathrm{i}}{2}\,\omega_1 w\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right) - \frac{\Gamma}{2}\, r \tag{15.47}$$

Dans le second membre de (15.46), tous les termes sont lentement variables. Pour mettre en évidence l'évolution temporelle des termes du second membre de (15.47), on pose

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\, r = r' \qquad \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\, \dot{r} = \mathrm{i}\omega r' + \dot{r}'$$

ce qui donne, en multipliant (15.47) par $\exp(-\mathrm{i}\omega t)$

$$\dot{r}' = \mathrm{i}(\omega_0 - \omega) r' - \frac{\mathrm{i}}{2}\,\omega_1 w\left(1 + \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}\right) - \frac{\Gamma}{2}\, r'$$

L'approximation séculaire consiste à négliger dans cette équation le terme rapidement variable $\exp(-2\mathrm{i}\omega t)$. On aboutit donc au système d'équations différentielles, les *équations de Bloch optiques*

$$\dot{w} = -\mathrm{i}\omega_1(r' - r'^*) - \Gamma(w+1) \tag{15.48}$$

$$\dot{r}' = \mathrm{i}(\omega_0 - \omega) r' - \frac{\mathrm{i}}{2}\,\omega_1 w - \frac{\Gamma}{2}\, r' \tag{15.49}$$

12. Un exemple est le milieu actif pour un laser, qui est décrit par des équations de Bloch optiques analogues à (15.44)–(15.45) : voir par exemple Mandel et Wolf [1995], chapitre 18.

### 15.3.2 Forces dissipatives et forces réactives

Lorsque l'atome interagit avec le champ laser pendant un intervalle de temps $t \gg \tau$, on atteint un régime stationnaire (ou permanent) $\dot{w} = \dot{r} = 0$, où il est facile d'écrire la solution du système différentiel (15.48)–(15.49). En passant par l'étape intermédiaire

$$r'_{\rm st} = \frac{{\rm i}\omega_1 w/2}{{\rm i}(\omega_0 - \omega) - \Gamma/2}$$

on trouve pour la valeur stationnaire $w_{\rm st}$ de $w$

$$w_{\rm st} = -\frac{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4 + \omega_1^2/2} \tag{15.50}$$

On en déduit $\rho_{bb} = (1 + w_{\rm st})/2 < 1/2$ : il ne peut pas y avoir *d'inversion de population*, c'est-à-dire de situation où le niveau excité est plus peuplé que le niveau fondamental. Le résultat stationnaire pour $r'$ est

$$r'_{\rm st} = \frac{{\rm i}\omega_1}{2}\,\frac{\Gamma/2 - {\rm i}(\omega - \omega_0)}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4 + \omega_1^2/2} \tag{15.51}$$

Il est commode d'introduire le *paramètre de saturation*, $s$, proportionnel à l'intensité $\mathcal{I}$ du laser (rappelons que le désaccord $\delta = \omega - \omega_0$)

$$s = \frac{\omega_1^2/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \propto \mathcal{I}_{\rm laser} \tag{15.52}$$

ce qui permet de récrire

$$\rho_{bb,{\rm st}} = \frac{1}{2}\,(1 + w_{\rm st}) = \frac{s}{2(1+s)} \qquad r'_{\rm st} = \frac{\rm i}{\omega_1}\left(\frac{s}{1+s}\right)\left(\frac{\Gamma}{2} - {\rm i}\delta\right) \tag{15.53}$$

Ces résultats permettent d'obtenir les forces exercées par la lumière laser sur un atome en régime permanent. Un argument simple permet de trouver l'équivalent de la pression de radiation sur l'atome : comme en régime permanent, la probabilité de trouver un atome dans l'état excité $E_b$ est $\rho_{bb,{\rm st}}$, le nombre moyen de photons spontanés émis par unité de temps est

$$\left\langle \frac{{\rm d}N}{{\rm d}t} \right\rangle = \Gamma\,\rho_{bb,{\rm st}} = \frac{\Gamma}{2}\,\frac{s}{1+s} \tag{15.54}$$

Ces photons sont émis de façon isotrope et contribuent à un mouvement désordonné de l'atome, que nous étudierons dans la sous-section suivante. Mais, l'atome une fois revenu dans son état fondamental absorbe un photon du champ laser, et *ces photons ont tous leur impulsion $\hbar\vec{k}$ dans la même direction*. Le nombre de photons absorbés est le même que le nombre de photons

émis spontanément, et l'atome est soumis à une force dissipative due à l'absorption de photons égale à la variation d'impulsion par unité de temps

$$\boxed{\vec{F}_{\rm diss} = \hbar\vec{k}\left\langle \frac{{\rm d}N}{{\rm d}t}\right\rangle = \hbar\vec{k}\frac{\Gamma}{2}\left(\frac{s}{1+s}\right) = \hbar\vec{k}\,\frac{\Gamma}{2}\,\frac{\omega_1^2/2}{\delta^2+\Gamma^2/4+\omega_1^2/2}} \qquad (15.55)$$

Lorsque le paramètre de saturation $s \gg 1$, l'accélération $\vec{a}$ approche sa valeur maximale

$$\vec{a}_{\rm max} = \frac{\hbar\vec{k}}{M}\,\frac{\Gamma}{2} \qquad (15.56)$$

où $M$ est la masse de l'atome. Pour la raie $D_2$ du sodium, $\Gamma^{-1} = 1.6\times 10^{-8}\,$s et $a_{\rm max} \sim 10^6\,{\rm ms}^{-2}$, environ $10^5$ fois l'accélération de la pesanteur.

Nous allons retrouver le résultat (15.55) pour la force dissipative en examinant la force exercée par le champ électromagnétique (15.34) sur le dipôle atomique. La forme de l'opérateur dipôle dans l'espace à deux dimensions de l'atome à deux niveaux est $D = d\sigma_1$, et, d'après (11.3), sa valeur moyenne est

$$\begin{aligned}\langle D\rangle &= d\,{\rm Tr}\,(\rho\sigma_1) = d(\rho_{ab}+\rho_{ab}^*)\\ &= d(r+r^*) = d\left(r'{\rm e}^{\,{\rm i}\omega t} + r'^*{\rm e}^{\,-{\rm i}\omega t}\right)\\ &= \frac{2ds}{\omega_1(1+s}\left[-\frac{\Gamma}{2}\,\sin\omega t + \delta\cos\omega t\right]\end{aligned} \qquad (15.57)$$

où nous avons utilisé l'expression (15.53) de $r'$ en régime permanent. Cette valeur moyenne du dipôle exhibe un terme $\propto \cos\omega t$ en phase avec le champ (15.34) et un terme en quadrature de phase $\propto \sin\omega t$. Le travail ${\rm d}W/{\rm d}t$ fourni par unité de temps par le champ (15.34) sur le dipôle, c'est-à-dire la puissance fournie à l'atome[13], est

$$\frac{{\rm d}W}{{\rm d}t} = E_0\cos\omega t\frac{{\rm d}\langle D\rangle}{{\rm d}t}$$

Compte tenu de (15.57) qui donne immédiatement ${\rm d}\langle D\rangle/{\rm d}t$

$$\frac{{\rm d}W}{{\rm d}t} = -\frac{2ds\omega E_0}{\omega_1(1+s)}\left[\frac{\Gamma}{2}\cos^2\omega t + \delta\sin\omega t\cos\omega t\right] \qquad (15.58)$$

et en prenant la moyenne temporelle

$$\left\langle\frac{{\rm d}W}{{\rm d}t}\right\rangle = -\frac{2ds\omega E_0}{\omega_1(1+s)}\,\frac{\Gamma}{4} = \frac{\hbar\omega s}{1+s}\,\frac{\Gamma}{2} \qquad (15.59)$$

13. Il est utile de se souvenir de l'oscillateur harmonique forcé élémentaire à une dimension

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = f\cos\omega t$$

La puissance fournie à l'oscillateur est $f(\cos\omega t){\rm d}x/{\rm d}t$. La correspondance avec le présent problème est donnée par $f \to E_0$ et $x \to \langle D\rangle$.

Le nombre de photons absorbés par seconde est

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} \right\rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \left\langle \frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} \right\rangle = \frac{\Gamma}{2} \left( \frac{s}{1+s} \right)$$

en accord avec (15.54). L'étude élémentaire de l'oscillateur harmonique forcé montre que c'est la composante de l'élongation en quadrature de phase avec la force externe qui est responsable de la dissipation par frottement, d'où l'expression “force dissipative” pour la pression de radiation. La partie en phase avec le champ est appelée “réactive”. Le modèle que nous avons étudié ne contient aucune dépendance spatiale, et dans ce cas, la valeur moyenne du terme de $\langle D \rangle$ en phase avec le champ ne produit aucun travail. Pour obtenir un résultat non nul, il faut introduire une dépendance spatiale. On montre alors (exercice 17.5.9) que la composante réactive de la force dépend du gradient de la fréquence de Rabi

$$\vec{F}_{\mathrm{react}} = -\frac{\hbar\delta}{2} \frac{\vec{\nabla}\omega_1^2(\vec{r})/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4 + \omega_1^2/2} \tag{15.60}$$

La force réactive est nulle dans une onde plane, où la fréquence de Rabi $\omega_1$ est indépendante de $\vec{r}$. Elle ne transmet aucune énergie aux atomes. Si, par exemple, la variation spatiale de la fréquence de Rabi est due à l'utilisation de plusieurs ondes laser, la force réactive a pour effet de redistribuer l'énergie entre les différentes ondes. Contrairement à la force dissipative, la force réactive ne sature pas lorsque $s \to \infty$.

La force réactive dérive d'un potentiel

$$\vec{F}_{\mathrm{react}} = -\vec{\nabla}U(\vec{r}) \qquad U(\vec{r}) = \frac{\hbar\delta}{2} \ln\left( 1 + \frac{\omega_1^2(\vec{r})/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \right)$$

Pour $\delta < 0$, une région où $\omega_1^2(\vec{r})$ est maximum apparaît comme un puits de potentiel attractif pour l'atome. Dans un champ laser inhomogène, l'atome est attiré vers les régions de forte intensité. Ceci est mis à profit dans de nombreuses applications pratiques où l'on manipule des objets microscopiques ; on fabrique ainsi des “pincettes optiques”, qui permettent par exemple de manipuler des brins d'ADN.

### 15.3.3 Refroidissement Doppler

Une application importante de la force dissipative (15.55) est le *refroidissement Doppler* des atomes. Ceux-ci sont modélisés comme précédemment par un système à deux niveaux séparés de $\hbar\omega_0$. Les atomes sont localisés dans des faisceaux laser provenant de directions opposées avec une fréquence identique $\omega$ proche de la résonance $\omega_0$, mais telle que $\omega < \omega_0$, c'est-à-dire avec un désaccord $\delta = \omega - \omega_0 < 0$. Afin de simplifier la discussion, nous nous limitons au refroidissement suivant un axe que nous prendrons comme

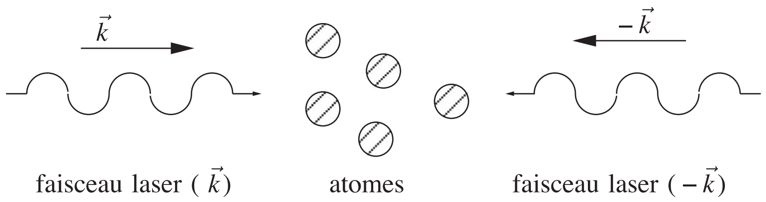



FIG. 15.1 – Principe du refroidissement Doppler.

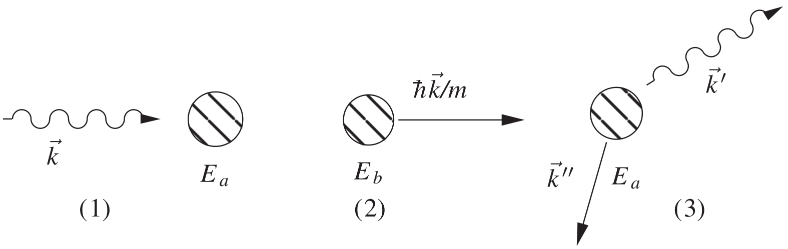



FIG. 15.2 – Cycle de fluorescence.

axe des $z$, et à deux faisceaux lasers dont les vecteurs d'onde sont $\vec{k} \parallel \hat{z}$ et $-\vec{k} \parallel -\hat{z}$ (figure 15.1). Pour un refroidissement suivant les trois dimensions d'espace, il faudrait prendre six faisceaux laser, deux suivant chaque axe, avec des vecteurs d'onde opposés. Nous allons nous placer dans le cas d'un paramètre de saturation $s \ll 1$, ce qui permettra de négliger le terme $\omega_1^2$ dans le dénominateur de (15.55).

Un atome dans le champ des lasers subira des *cycles de fluorescence*. Un cycle de fluorescence comprend l'absorption d'un photon d'un des deux lasers par un atome dans son état fondamental, ce qui envoie cet atome dans son état excité, suivi de l'émission spontanée d'un photon qui remet l'atome dans son état fondamental (figure 15.2). Soit $n_+(v)$, le nombre de cycles de fluorescence par seconde que subit un atome de vitesse $v$ (dirigée suivant l'axe des $z$ puisque notre discussion est limitée à une dimension), avec absorption de photons de vecteur d'onde $+\vec{k}$, et $n_-(v)$, le nombre de cycles de fluorescence avec absorption d'un photon de vecteur d'onde $-\vec{k}$. Si un atome se dirige vers la gauche ($v < 0$), il verra par effet Doppler des photons de fréquence $\omega - kv$ s'ils proviennent du faisceau $+\vec{k}$, et de fréquence $\omega + kv$ s'ils proviennent du faisceau $-\vec{k}$. En raison du désaccord négatif ($\omega < \omega_0$), les photons de vecteur d'onde $+\vec{k}$ seront plus proches de la résonance et absorbés en plus grand nombre que les photons de vecteur d'onde $-\vec{k}$, qui sont eux, au contraire, plus éloignés de la résonance. Ceci donnera pour ces atomes une force dirigée vers la droite. Inversement, pour des atomes se dirigeant vers la droite ($v > 0$), la force sera dirigée vers la gauche. En résumé, les atomes se dirigeant vers la

gauche absorberont préférentiellement les photons de vecteur d'onde $+\vec{k}$, les atomes se dirigeant vers la droite absorberont préférentiellement les photons de vecteur d'onde $-\vec{k}$ : dans les deux cas, les atomes seront ralentis et nous voyons apparaître une force de type visqueux, et c'est pourquoi on parle parfois de "mélasse optique". La force moyenne sur un atome de vitesse $v$ est

$$\langle\vec{F}\rangle = \hbar\vec{k}[n_+(v) - n_-(v)] \tag{15.61}$$

avec

$$n_\pm(v) = \frac{\Gamma}{4}\,\frac{\omega_1^2}{(\delta \mp kv)^2 + \Gamma^2/4} \tag{15.62}$$

Développons (15.62) en puissances de la vitesse à l'ordre $v$

$$n_\pm(v) \simeq \frac{\Gamma\omega_1^2/4}{\delta^2 + \Gamma^2/4}\left[1 \pm \frac{2\delta kv}{\delta^2 + \Gamma^2/4}\right] \tag{15.63}$$

Cette équation donne le nombre moyen $n_0$ de cycles de fluorescence par seconde

$$n_0 = \frac{1}{2}\big(n_+(v) + n_-(v)\big) = \frac{\Gamma\omega_1^2/4}{\delta^2 + \Gamma^2/4} = \frac{\Gamma}{2}\,s \tag{15.64}$$

et la force, proportionnelle à

$$n_+(v) - n_-(v) = n_0\,\frac{4\delta kv}{\delta^2 + \Gamma^2/4}$$

qui vaut

$$\langle\vec{F}\rangle = \hbar\vec{k}\big(n_+(v) - n_-(v)\big) = n_0 v\,\frac{4\hbar\delta k^2}{\delta^2 + \Gamma^2/4}\,\hat{k} \tag{15.65}$$

Le coefficient de viscosité $\gamma$ est défini par

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = -\gamma v \tag{15.66}$$

et sa valeur se déduit de (15.65)

$$\boxed{\gamma = -\frac{\langle F\rangle}{Mv} = -n_0\,\frac{4\hbar k^2}{M}\,\frac{\delta}{\delta^2 + \Gamma^2/4}} \tag{15.67}$$

qui est un nombre positif car $\delta < 0$. Si l'on prend $n_0$ constant, le coefficient de viscosité est maximal pour $\delta = -\Gamma/2$

$$\gamma_{\max} = \frac{4\hbar k^2}{M\Gamma}\,n_0 = \frac{8n_0}{\hbar\Gamma}\,\frac{\hbar^2k^2}{2M} = \frac{8n_0}{\hbar\Gamma}\,E_R \tag{15.68}$$

L'énergie $E_R = Mv_R^2/2$ est appelée *énergie de recul* : c'est l'énergie cinétique de recul lorsque l'atome initialement au repos émet un photon d'impulsion

$\hbar k$, et c'est aussi l'énergie acquise par un atome initialement au repos qui absorbe un photon d'impulsion $\hbar k$. La vitesse $v_R$ est la vitesse de recul. Donnons quelques valeurs numériques pour le rubidium. La longueur d'onde de la transition est $\lambda = 0.78\,\mu$m, la largeur de raie $\Gamma = 3.7 \times 10^7\,\mathrm{s}^{-1}$, la masse de l'atome $M = 1.41 \times 10^{-25}\,$kg. Ces valeurs correspondent à une énergie $\hbar\Gamma = 2.4 \times 10^{-8}\,$eV, une vitesse de recul $v_R = \hbar k/m = 5.8 \times 10^{-3}\,\mathrm{ms}^{-1}$ et une énergie de recul $E_R = 1.5 \times 10^{-11}\,$eV, et donc à une *température de recul* $T_R = E_R/k_B = 1.7 \times 10^{-7}\,$K.

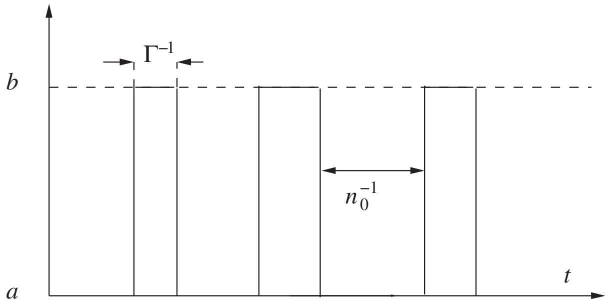



FIG. 15.3 – Séquence de cycles de fluorescence.

Avec ces valeurs numériques typiques, on trouve

$$\gamma \simeq 5 \times 10^{-3} n_0 = 2.5 \times 10^{-3}\,\Gamma s$$

On peut choisir le paramètre de saturation $s \ll 1$ de telle sorte que

$$\Gamma^{-1} \ll n_0^{-1} \ll \gamma^{-1}$$

Dans ces conditions, il existe trois échelles de temps bien distinctes dans le problème (figure 15.3). La relation $\Gamma^{-1} \ll n_0^{-1}$ montre que les cycles de fluorescence ne se recouvrent pas et sont indépendants. Considérons un intervalle de temps $\delta t$, avec $\Gamma^{-1} \ll \delta t \ll \gamma^{-1}$. Soit $N_\pm$ le nombre de cycles de fluorescence $\pm k$ dans cet intervalle $\delta t$. La condition $\delta t \ll \gamma^{-1}$ implique que la vitesse $v$ de l'atome n'a pas le temps de varier de façon appréciable sous l'action de la force de viscosité pendant l'intervalle $\delta t$ et on pourra faire des moyennes sur cet intervalle, avec $\langle N_\pm \rangle = n_\pm(v)\delta t$. Soit $\mathsf{p}(N_+, N_-; \delta t)$ la probabilité d'observer $N_+$ cycles $+k$ et $N_-$ cycles $-k$ pendant $\delta t$. L'indépendance des cycles de fluorescence permet d'écrire pour cette probabilité une loi de Poisson

$$\mathsf{p}(N_+, N_-; \delta t) = \frac{\langle N_+ \rangle^{N_+} \langle N_- \rangle^{N_-} \exp[-(\langle N_+ \rangle + \langle N_- \rangle)]}{N_+!\, N_-!}$$

Désignons par $\hbar q_1, \ldots \hbar q_{(N_+ + N_-)}$ les $N_+ + N_-$ impulsions des photons émis spontanément par l'atome dans l'intervalle $\delta t$ et $\hbar Y$ leur somme

$$\hbar Y = \hbar q_1 + \ldots + \hbar q_{(N_+ + N_-)}$$

Les photons émis ne sont pas corrélés entre eux et $\langle Y \rangle = 0$. La variation moyenne d'impulsion pendant le temps $\delta t$ est due uniquement aux photons absorbés

$$\langle p(\delta t) \rangle = \big(n_+(v) - n_-(v)\big)\hbar k \delta t \tag{15.69}$$

Évaluons maintenant la variance de $p(\delta t)$

$$\Delta p^2(\delta t) = \Big\langle p^2(\delta t) - \langle p(\delta t) \rangle^2 \Big\rangle$$

Comme les photons spontanés ne sont pas corrélés avec les photons absorbés, $\langle Y k \rangle = 0$ et on peut traiter séparément les deux contributions. La contribution à la variance des photons absorbés est

$$\Delta p^2(\delta t)|_{\rm abs} = \hbar^2 k^2 \Big\langle (N_+ - N_-)^2 - (\langle N_+ \rangle - \langle N_- \rangle)^2 \Big\rangle = 2\hbar^2 k^2 n_0 \delta t$$

où nous avons utilisé la propriété classique de la loi de Poisson : $\Delta N_\pm^2 = \langle N_\pm \rangle$ ainsi que l'indépendance des cycles + et − : $\langle N_+ N_- \rangle = \langle N_+ \rangle \langle N_- \rangle$, tandis que la contribution des photons émis est

$$\Delta p^2(\delta t)|_{\rm em} = \hbar^2 \langle Y^2 \rangle = \hbar^2 \sum_{i=1}^{N_+ + N_-} q_i^2 = \hbar^2 k^2 \langle N \rangle = 2n_0 \hbar^2 k^2 \delta t$$

Comme nous avons réduit la cinématique à une dimension, nous avons admis que les photons émis ont une impulsion $\pm\hbar k$ avec une probabilité 1/2 [14]. En additionnant les deux contributions[15]

$$\Delta p^2(\delta t) = 4n_0 \hbar^2 k^2 \delta t \tag{15.70}$$

Ainsi que nous allons le montrer, ce résultat correspond à une marche au hasard dans un espace des impulsions à une dimension. Dans une marche au hasard sur une droite, un marcheur effectue un pas de longueur $l$ à droite ou un pas de longueur $l$ à gauche avec une probabilité 1/2. Au bout de $N$ pas, il a parcouru une distance moyenne nulle, $\langle x \rangle = 0$, mais la distance quadratique moyenne n'est pas nulle

$$\langle x^2 \rangle = \Delta x^2 = N l^2$$

et si chaque pas prend un temps $\tau$, au bout d'un temps $\delta t = N\tau$

$$\Delta x^2 = \frac{l^2}{\tau}\,\delta t = 2D\,\delta t \tag{15.71}$$

14. Dans le cas d'une cinématique à trois dimensions et de photons émis de façon isotrope, nous aurions $\langle \hbar^2 Y^2 \rangle = \hbar^2 k^2/3$.

15. Avec une cinématique à trois dimensions

$$\Delta p^2(\delta t) = \frac{8}{3}\, n_0 \hbar^2 k^2 \delta t$$

Cette équation définit le *coefficient de diffusion*[16] $D$. La proportionnalité de $\Delta p^2$ à $\delta t$ dans (15.70) justifie l'expression "marche au hasard dans l'espace des impulsions", avec un coefficient de diffusion $D = 2n_0\hbar^2k^2$.

Dans cette marche au hasard, l'énergie cinétique $E$ de l'atome augmente de $\Delta p^2(\delta t)/(2M)$. La diffusion tend donc à augmenter l'énergie cinétique. Par analogie avec la mécanique statistique, on définit une température fictive $T$ par

$$E = \frac{1}{2}k_\mathrm{B}T \tag{15.72}$$

où $k_\mathrm{B}$ est la constante de Boltzmann. Si $E$ augmente, $T$ augmente, et on peut dire que les atomes s'échauffent sous l'effet de l'émission spontanée, qui crée un mouvement désordonné analogue à une agitation thermique. Cependant, la température est bien fictive, car il n'existe pas d'équilibre thermodynamique : la température (15.72) est parfaitement définie pour un atome isolé ! La viscosité a tendance à ralentir les atomes, et donc à les "refroidir". Lorsque les deux effets s'équilibrent, on obtient une "température d'équilibre" qui est la température fictive des atomes en régime permanent. Cette température est, en fait, une façon imagée de mesurer leur vitesse moyenne. D'après (15.66), la viscosité donne la contribution suivante à la variation temporelle de l'énergie

$$\left.\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}\right|_\mathrm{visc} = \frac{1}{2}\,M\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,v^2 = -M\gamma v^2 = -\frac{\gamma p^2}{M} \tag{15.73}$$

et en ajoutant l'effet de l'émission spontanée

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = \frac{2n_0\hbar^2k^2}{M} - \frac{\gamma p^2}{M}$$

La condition de régime permanent $\mathrm{d}E/\mathrm{d}t = 0$ donne la valeur d'équilibre $p^2_\mathrm{eq}$ de $p^2$, et choisissant $\gamma = \gamma_\mathrm{max}$ suivant (15.68)

$$p^2_\mathrm{eq} = \frac{2n_0\hbar^2k^2}{\gamma_\mathrm{max}} = \frac{1}{2}\hbar\Gamma M$$

ce qui donne pour la température $T = T_D$

$$\boxed{k_\mathrm{B}T_D = \frac{p^2_\mathrm{eq}}{M} = \frac{1}{2}\,\hbar\Gamma} \tag{15.74}$$

Cette température, de l'ordre de $100\,\mu$K pour le rubidium, est appelé *température Doppler* et on a donc obtenu un *atome froid* ! La condition d'équilibre $\mathrm{d}E/\mathrm{d}t = 0$ peut aussi s'écrire en fonction du coefficient de diffusion en impulsion

$$D = \gamma p^2_\mathrm{eq} = M\gamma k_\mathrm{B}T \tag{15.75}$$

16. Voir la note 1 du chapitre 13.

Cette équation qui relie les coefficients de diffusion $D$ et de viscosité $\gamma$ à la température est très générale[17] et est connue sous le nom de *relation d'Einstein*. Dans le cas du mouvement brownien, les forces de viscosité et la diffusion ont une origine commune : les collisions de la particule brownienne avec les molécules du fluide, et il n'est pas surprenant que coefficients de diffusion et de viscosité soient liés. Diffusion et viscosité sont deux processus dissipatifs : dans notre cas, le processus dissipatif est l'émission spontanée.

### 15.3.4 Piège magnéto-optique

Le refroidissement Doppler est le refroidissement maximum que l'on peut obtenir si on se limite au modèle de l'atome à deux niveaux. Pour aller plus loin, et en particulier pour mettre au point des mécanismes de refroidissement encore plus efficaces, permettant de descendre au microkelvin et même au-delà, il faut faire appel à la sous-structure, fine et hyperfine, des niveaux. Nous allons considérer un exemple élémentaire, en prenant un niveau fondamental $(g)$ $j = 0$ et un niveau excité $(e)$ $j = 1$ que nous allons scinder en trois sous-niveaux grâce à l'effet Zeeman. Ceci nous permettra de piéger les atomes non seulement en vitesse, comme dans le refroisissement Doppler, mais aussi dans l'espace. Comme on doit utiliser un champ magnétique pour obtenir l'effet Zeeman, on appelle un tel piège *piège magnéto-optique*. On utilise un champ magnétique inhomogène orienté suivant $Oz$ et dépendant de $z$, $B(z) = -bz$, $b > 0$. D'après (15.26), les niveaux Zeeman de l'état excité $(e)$ de nombre quantique magnétique $m_{\rm e}$ sont donnés par[18]

$$W_{m_{\rm e}} = -\mu B m_{\rm e} = -g\frac{q_{\rm e}\hbar B}{2m}\, m_{\rm e} \quad \text{avec} \quad \mu = g\frac{q_{\rm e}\hbar}{2m} < 0$$

Les niveaux Zeeman de l'état excité ont donc des énergies $-\mu bz$ $(m_{\rm e} = -1)$, $0\,(m_{\rm e} = 0)$ et $+\mu bz\,(m_{\rm e} = 1)$, en prenant $Oz$ comme axe de quantification du moment angulaire.

Reprenons la configuration des faisceaux lasers du refroidissement Doppler étudié précédemment, mais en supposant maintenant ces faisceaux polarisés circulairement à gauche : la conservation du moment angulaire suivant $Oz$ (*cf.* (9.106)–(9.107)) implique que $m_{\rm e} = -1$ si l'atome absorbe un photon de vecteur d'onde $+\vec{k}$ et $m_{\rm e} = +1$ s'il absorbe un photon de vecteur d'onde $-\vec{k}$ : figure 15.4. Supposons $\delta < 0$ ; pour $z > 0$, le signe de $B$ implique que le niveau $m_{\rm e} = +1$ est plus bas que le niveau $m_{\rm e} = -1$, et ce niveau est donc plus proche de la résonance (figure 15.4). Ceci entraîne que l'atome va absorber de façon préférentielle les photons de vecteur d'onde $-\vec{k}$ et il sera repoussé vers la gauche. L'inverse se produit si l'atome se trouve dans la zone $z < 0$ où le niveau $m_{\rm e} = -1$ est plus bas que le niveau $m_{\rm e} = +1$ : l'atome absorbe

17. Voir par exemple Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 6.

18. Afin d'éviter toute confusion avec la masse de l'électron, nous notons le nombre quantique magnétique $m_{\rm e}$.

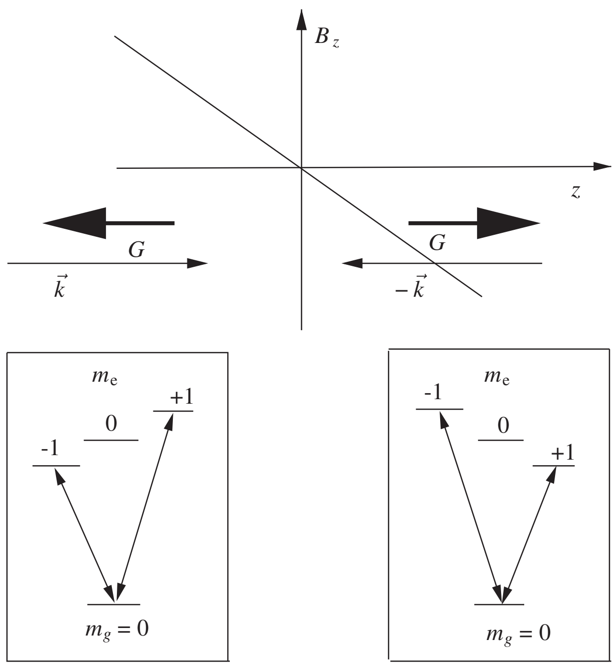



FIG. 15.4 – Niveaux Zeeman pour $z < 0$ et $z > 0$.

préférentiellement des photons de vecteur d'onde $+\vec{k}$, et il est repoussé vers la droite. L'action des deux faisceaux se traduit par l'existence de deux forces : une force de viscosité $-\gamma Mv$ et une force de rappel $-\kappa z$

$$F = -\gamma Mv - \kappa z \tag{15.76}$$

auxquelles s'ajoute une diffusion dans l'espace des impulsions. Non seulement les atomes sont ralentis, mais ils sont aussi confinés par la force de rappel dans la région $z \simeq 0$ : c'est le principe du piège magnéto-optique. En pratique, on souhaite confiner les atomes dans les trois directions d'espace, et il faut donc utiliser six faisceaux lasers polarisés (figure 15.5).

## 15.3.5 Fontaines atomiques

L'utilisation des atomes froids permet d'améliorer considérablement la précision des horloges atomiques. Comme nous l'avons vu au § 5.4.3, le temps de parcours $T$ entre les cavités est le temps d'interrogation effectif de l'atome, et plus ce temps d'interrogation est long, plus précise sera l'horloge. Pour des horloges atomiques standard utilisant des atomes sortant d'un four, nous avons vu que la précision relative est de l'ordre de $10^{-13}$, soit une dérive d'une seconde sur 300 000 ans. La distance $L$ entre les cavités (figure 5.21) étant

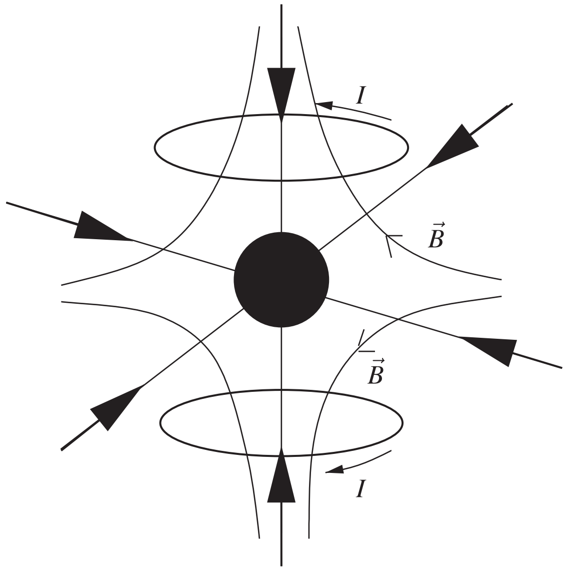



FIG. 15.5 – Configuration des lasers pour le piège magnéto-optique.

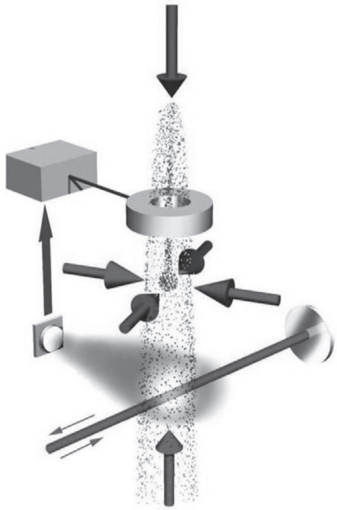


FIG. 15.6 – Une fontaine atomique. Les atomes piégés dans le piège magnéto-optique (flèches horizontales) sont envoyés vers le haut avec une vitesse de l'ordre de 5 m/s. Ils passent deux fois, à la montée et à la descente, dans la cavité (anneau) et sont détectés par un laser. Courtoisie de Christophe Salomon.

fixée et de l'ordre du mètre, pour augmenter le temps de vol $T$, il faut diminuer la vitesse, autrement dit il faut ralentir les atomes et donc avoir recours aux atomes froids.

Une fontaine atomique réalise une horloge utilisant des atomes froids (figure 15.6). On forme d'abord un nuage d'atomes froids dans un piège magnéto-optique et on le fait passer deux fois dans une cavité unique. Le nuage est lancé vers le haut et passe une première fois dans la cavité ; après avoir atteint une hauteur d'un mètre environ, il retombe sous l'effet de la pesanteur et passe une seconde fois dans la cavité. Le temps d'aller-retour $T$, ou temps d'interrogation effectif, est d'une seconde environ, au lieu de quelques millisecondes dans un horloge atomique ordinaire. Ceci permet de gagner un facteur 100 environ, et la précision relative atteint $10^{-15}$, soit une dérive d'une seconde sur trente millions d'années !

## 15.4 Exercices

### 15.4.1 Perturbation au second ordre et forces de van der Waals

Les forces de van der Waals entre deux atomes neutres sont dues à des interactions entre moments dipolaires induits. On se propose de les évaluer dans le cas de deux atomes d'hydrogène se trouvant dans leur état fondamental $|\varphi_0\rangle$. Pour ce faire, nous aurons besoin de la théorie des perturbations au second ordre.

**1.** *Perturbations au second ordre.* On détermine d'abord $|\varphi_1\rangle$ en supposant $|\varphi_0\rangle$ non dégénéré ; les notations sont celles du § 15.1.2. Montrer que

$$(E_0 - H_0)|\varphi_1\rangle = (W - E_1)|\varphi_0\rangle$$

En poussant les développements (15.3) et (15.4) au second ordre en $\lambda$, montrer que

$$E_2 = \langle\varphi_0|W|\varphi_1\rangle$$

On rappelle que $|\varphi_0\rangle \equiv |n\rangle$ et que

$$H_0|n\rangle = E_0^{(n)}|n\rangle \qquad H_0|k\rangle = E_0^{(k)}|k\rangle$$

Montrer l'identité

$$I = |n\rangle\langle n| + (E_0 - H_0)^{-1}\left(\sum_{k\neq n}|k\rangle\langle k|\right)(E_0 - H_0)$$

et en déduire (15.7)

$$E_2 = \sum_{k\neq n}\frac{|\langle n|W|k\rangle|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(k)}}$$

**2.** Les protons des deux atomes d'hydrogène se trouvent à une distance $R \gg a_0$, $a_0$ étant le rayon de Bohr (1.41) ; $\vec{R}$ est le vecteur joignant le proton 1 au proton 2 et l'axe $Oz$ est orienté suivant $\vec{R}$. On note $\vec{r}_1$ le vecteur joignant l'électron 1 au proton 1, $\vec{r}_2$ le vecteur joignant l'électron 2 au proton 2 et $\vec{d}_i = q_e\vec{r}_i$ le moment dipolaire électrique de l'atome $i$. Montrer qu'en physique classique l'énergie d'interaction des deux dipôles est

$$\begin{aligned} W &= \frac{e^2}{R^3}\left[\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 - 3(\vec{r}_1 \cdot \hat{R})(\vec{r}_2 \cdot \hat{R})\right] \\ &= \frac{e^2}{R^3}\left[x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2\right] \end{aligned}$$

**3.** Pour obtenir l'expression quantique de $W$, on utilise le principe de correspondance en remplaçant les nombres $x_1, \cdots, z_2$ par des opérateurs $X_1, \cdots, Z_2$

$$W = \frac{e^2}{R^3}\left[X_1X_2 + Y_1Y_2 - 2Z_1Z_2\right]$$

Montrer que la valeur moyenne de $W$ est nulle au premier ordre de la théorie des perturbations

$$E_1 = \langle\varphi_{01}\varphi_{02}|W|\varphi_{01}\varphi_{02}\rangle = 0$$

**4.** Au second ordre, si $|\varphi_\alpha\rangle$ désigne un état excité ou un état du continu d'énergie $E_\alpha$

$$E_2 = \sum_{\alpha_1,\alpha_2} \frac{|\langle\varphi_{\alpha_1}\varphi_{\alpha_2}|W|\varphi_{01}\varphi_{02}\rangle|^2}{-2R_\infty - E_{\alpha_1} - E_{\alpha_2}}$$

où $R_\infty$ est la constante de Rydberg (1.42). Pour obtenir un ordre de grandeur de $E_2$, on néglige $E_{\alpha_1}$ et $E_{\alpha_2}$ au dénominateur. En déduire

$$E_2 \sim -6\,\frac{e^2}{R}\left(\frac{a_0}{R}\right)^5$$

L'énergie d'interaction varie comme $R^{-5}$ et la force comme $R^{-6}$. Montrer que l'estimation précédente n'est plus valable si $R \gtrsim \hbar c/R_\infty$. Pour des distances $R \gg \hbar c/R_\infty$, on montre que la loi de forces est en $R^{-7}$.

### 15.4.2 Corrections d'ordre $\alpha^2$ aux niveaux d'énergie

*Suggestion. Dans ce problème comme dans le suivant, il est recommandé pour les application numériques d'écrire les énergies sous la forme d'un facteur sans dimensions multipliant $R_\infty = 13.61$ eV.*

En plus de la structure fine, il existe deux autres corrections $O(v/c)^2$ aux niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène (ou plus généralement des atomes à un seul électron).

**1.** *Correction cinématique.* La forme relativiste de l'énergie cinétique de l'électron est

$$K = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} = mc^2 + \frac{p^2}{2m_e} - \frac{1}{8}\,\frac{p^4}{m_e^3c^2} + O\left(\frac{p^6}{m_e^5c^4}\right)$$

Vérifier que ce développement en puissances de $p/mc$ est valable si $p/(mc) \ll 1$. Le premier terme est l'énergie de masse, une simple constante additive, le second est la forme non relativiste de l'énergie cinétique prise en compte dans la résolution de l'équation de Schrödinger ; l'objectif est d'évaluer les corrections dues au troisième terme $O(p^4)$. Montrer que ce terme donne une correction $\Delta E_K \propto \alpha^2(v/c)^2 = O(\alpha^4)$ aux niveaux d'énergie. Afin d'évaluer cette correction de façon précise, on utilise la théorie des perturbations. Montrer qu'au premier ordre de cette théorie

$$\Delta E_K = -\frac{1}{8m_e^3c^2}\int \mathrm{d}^3p\, p^4\, |\tilde{\varphi}(\vec{p})|^2$$

où $\tilde{\varphi}(\vec{p})$ est la transformé de Fourier de la fonction d'onde $\varphi(\vec{r})$

$$\tilde{\varphi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3r\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\varphi(\vec{r})$$

Calculer $\Delta E_K$ pour le niveau $1s$ de l'atome d'hydrogène. Les intégrales nécessaires se déduisent de

$$I(x) = \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}q}{q^2+x} = \frac{\pi}{2}\, x^{-1/2}$$

par dérivation par rapport à $x$ $(x > 0)$.

**2.** *Terme de Darwin.* La seconde correction vient de ce qu'à l'approximation non relativiste de l'équation de Dirac (chapitre 19), la localisation de l'électron ne peut se faire au mieux qu'à $\hbar/(m_ec)$ près, où $\hbar/(m_ec)$ est la longueur d'onde Compton de l'électron. Pour tenir compte de cette extension spatiale, on écrit l'énergie potentielle

$$E_{\mathrm{pot}} = \int \mathrm{d}^3u\, f(|\vec{u}|)V(\vec{r}+\vec{u})$$

où $V$ est l'énergie potentielle habituelle et $f(u)$, à symétrie sphérique, possède une extension $\sim \hbar/(m_ec)$ et est normalisée par

$$\int \mathrm{d}^3u\, f(u) = 1$$

En développant $V(\vec{r}+\vec{u})$ au voisinage de $u = 0$, montrer que

$$E_{\mathrm{pot}} = V(\vec{r}) + O\left[\left(\frac{\hbar}{m_ec}\right)^2\right]\nabla^2V + O\left(\frac{\hbar}{m_ec}\right)^4$$

L'équation de Dirac donne le coefficient exact

$$E_{\mathrm{pot}} = V(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{8m_e^2c^2}\nabla^2V + O\left(\frac{\hbar}{m_ec}\right)^4$$

Le deuxième terme de $E_{\rm pot}$ est appelé *terme de Darwin*. Montrer que ce terme n'affecte que les ondes $s$ et vaut

$$\Delta E_D = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2 m_e^2 c^2} \, |\varphi(\vec{r}=0)|^2$$

Évaluer numériquement $\Delta E_D$ pour le niveau $1s$ de l'hydrogène.

### 15.4.3 Atomes muoniques

Le muon ($\mu$) est un lepton en tout point identique à l'électron, à l'exception de sa masse $m_\mu \simeq 105.7\,\mathrm{MeV/c^2} \simeq 206.8\, m_e$ (*cf. le* § 1.1.3). Un atome peut capturer un muon négatif $\mu^-$ qui se met sur orbite autour du noyau atomique, exactement comme un électron, et forme un "atome muonique".

**1.** Calculer, en fonction du numéro atomique $Z$ de l'atome, du rapport $m_\mu/m_e$ et de $a_0 = \hbar^2/(m_e e^2)$, le rayon de Bohr $a_\mu^Z$ du muon pour un atome de numéro atomique $Z$ en écrivant

$$a_\mu^Z = \frac{1}{Z\alpha(A)} \, a_0$$

On tiendra compte de la masse réduite dans le calcul de $\alpha(A)$. Comparer $a_\mu^Z$ au rayon $R$ du noyau pour l'aluminium ($Z = 13,\ A = 27$) et le plomb ($Z = 82\ A = 208$). On rappelle que $R$ est donné par $R \simeq 1.2 \times A^{1/3}\,\mathrm{fm}$, $A$ étant le nombre de nucléons.

**2.** Soit $\Delta E_e^{Z=1} = \Delta E_e = E_{2p} - E_{1s}$ la différence d'énergie entre les niveaux $2p$ et $1s$ de l'atome d'hydrogène. Calculer la quantité correspondante $\Delta E_\mu^Z$ pour un atome de numéro atomique $Z$ en fonction de $\Delta E_e$ et de $m_\mu/m_e$. Comparer aux valeurs expérimentales

Aluminium : $\Delta E_\mu^{13} = 0.3443\,\mathrm{MeV}$ Plomb : $\Delta E_\mu^{82} = 5.96\,\mathrm{MeV}$

Quel est le type de photon émis dans ces transitions ?

**3.** Montrer que l'effet d'écran des électrons des couches internes est négligeable. Au contraire, une correction importante vient de l'extension finie du noyau atomique. En supposant une distribution de charge uniforme dans le noyau, montrer que le potentiel vu par le muon n'est pas $-Ze^2/r$ mais

$$V(r) = \frac{Ze^2}{2R}\left[\left(\frac{r}{R}\right)^2 - 3\right] \quad r < R$$

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \qquad r > R$$

On se propose de calculer le déplacement des niveaux par la méthode des perturbations au premier ordre, en partant de la solution pour le potentiel coulombien exact. Quelle perturbation $W(r)$ doit-on utiliser ? Montrer qualitativement que l'effet d'extension finie du noyau est négligeable sauf pour les

états $s$, et que dans ce cas le déplacement vaut pour $Z$ petit et une orbite de nombre quantique principal $n$, de rayon grand par rapport à $R$

$$\Delta E_n = \frac{2\pi Z e^2}{5} R^2 |\varphi_n(\vec{r} = 0)|^2$$

où $\varphi_n(\vec{r})$ est la fonction d'onde non perturbée. Montrer que pour l'état 1$s$

$$\Delta E = \frac{4}{5} R_\infty \left( \frac{Z^2 m'_\mu}{m_e} \right) \left( \frac{R}{a_\mu^Z} \right)^2$$

où $m'_\mu$ est la masse réduite. Évaluer numériquement ce déplacement pour l'aluminium[19]. La correction va-t-elle dans le bons sens ? Est-il raisonnable d'appliquer la méthode dans le cas du plomb ?

**4.** Montrer que le rapport des énergies caractéristiques de la structure fine aux énergies caractéristiques des niveaux est le même pour l'électron et le muon. Montrer, en revanche, que ce rapport est plus grand d'un facteur $m_\mu/m_e$ pour la structure hyperfine.

### 15.4.4 Atomes de Rydberg

Les résultats de l'exercice 9.7.9 permettent d'écrire les fonctions d'onde radiales $u_{nl}(r)$ de l'atome d'hydrogène sous la forme

$$u_{nl}(r) = \sum_{q=0}^{n-l-1} c_q \left( \frac{r}{a_0} \right)^{q+l+1} \exp\left( -\frac{r}{na_0} \right)$$

Pour écrire l'expression du coefficient $c_q$, il est commode de définir $k = n - l$

$$c_q = \left( -\frac{2}{n} \right)^q \frac{(k-1)!(2l+1)!}{q!(q+2l+1)!(k-q-1)!}$$

où $c_0$ est fixé par la condition de normalisation de la fonction d'onde. On s'intéressera à des valeurs de $n \gg 1$, typiquement $n \sim 50$.

**1.** Montrer que si $l$ prend sa valeur maximale $l = l_{\max} = n - 1$, la fonction d'onde radiale présente un pic étroit au voisinage du point $r = a_0 n^2$. Quelle est la largeur $\Delta r$ de ce pic ? Suggestion : étudier la fonction

$$f_n(x) = x^n \, \mathrm{e}^{-x/n}$$

19. En dehors de la correction d'extension finie du noyau, la correction la plus importante vient de la polarisation du vide due à la création de paires virtuelles électron-positron. La correction pour l'état 1$s$ de l'aluminium est de $-2.25$ KeV. Le signe de cette correction est négatif : en effet, à courte distance, $\alpha$ est plus grand que 1/137 et le muon qui voit une charge plus grande est plus lié que si $\alpha$ était constant. Ce comportement de $\alpha$ a été mentionné dans la note 37 du chapitre 1 : $\alpha$ croît avec l'énergie, et d'après l'inégalité de Heisenberg, courte distance implique grande impulsion, et donc grande énergie.

et montrer que pour $x \simeq x_0 = n^2$

$$f_n(x) \simeq f_n(x_0)\ \exp\left[-\frac{1}{2n^3}\,(x-x_0)^2\right]$$

Montrer qualitativement que si $l < n-1$, la dispersion $\Delta r$ est plus grande que pour $l = n-1$.

**2.** On s'intéresse maintenant à la partie angulaire. D'après (9.53),

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \mathrm{e}^{\,im\phi} f_l^m(\theta)$$

En utilisant $L_+ Y_l^l = 0$ et l'expression (9.48) de $L_+$, montrer que

$$Y_l^l(\theta,\phi) \propto \mathrm{e}^{\,il\phi}\sin^l\theta$$

En déduire que si $l \gg 1$, $|Y_l^l(\theta,\phi)|^2$ est non nul uniquement au voisinage du plan $xOy$ (c'est-à-dire pour $\theta = \pi/2$), et calculer la dispersion $\Delta\theta$. Que se passe-t-il si $|m| \neq l$ ?

**3.** Déduire des deux premières questions que pour $n \gg 1$, les états $l = n-1$ et $|m| = l$ sont localisés dans un tore horizontal de rayon $n^2 a_0$ dont la section est un cercle de rayon $a_0 n^{3/2}$. Comparer avec les orbites (1.40) obtenues à partir des prescriptions de Bohr.

### 15.4.5 Terme diamagnétique

Lorsque nous avons établi la forme du hamiltonien (15.23) de l'effet Zeeman, nous avons négligé un terme $\propto \vec{A}^{\,2}$, dit *terme diamagnétique*. Pour justifier cette approximation, examinons le cas d'un champ magnétique uniforme et constant $\vec{B}$, une expression possible pour $\vec{A}$ étant (*cf.* (10.64))

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\,\vec{B}\times\vec{r}$$

**1.** Montrer que l'on peut écrire le hamiltonien quantique d'un électron de charge $q$ dans ce champ magnétique sous la forme

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m_e}(\vec{P}-q\vec{A})^2 \\
&= \frac{\vec{P}^2}{2m_e} - \frac{q}{2m_e}\,\vec{B}\cdot\vec{L} + \frac{q^2}{8m_e}\,\left[\vec{R}^2\vec{B}^2 - (\vec{R}\cdot\vec{B})^2\right] \\
&= H_0 + H_Z + H_D
\end{aligned}$$

où $\vec{L} = \vec{R}\times\vec{P}$ est le moment angulaire orbital. On justifiera soigneusement les commutations d'opérateurs.

**2.** Identifier $H_Z$ à la partie du hamiltonien Zeeman (15.23) d'origine orbitale, et donner l'ordre de grandeur de ce terme pour un champ magnétique

de 1 T lorsque l'électron est lié dans un atome. On peut écrire le terme diamagnétique $H_D$ sous la forme

$$H_D = \frac{q^2 B^2}{8m_e} \vec{R}_\perp^2$$

où $\vec{R}_\perp$ est la composante de $\vec{R}$ perpendiculaire à $\vec{B}$. Quel ordre de grandeur peut-on choisir pour $\langle \vec{R}_\perp^2 \rangle$ ? En déduire que $|\langle H_D \rangle| \ll |\langle H_Z \rangle|$ pour un électron lié dans un atome, et que le terme diamagnétique peut être négligé dans le calcul de l'effet Zeeman. En revanche, ce terme ne peut pas être négligé dans le calcul des niveaux de Landau, car le rayon des orbites électroniques est alors macroscopique.

## 15.5 Bibliographie

La théorie des perturbations et la méthode variationnelle sont exposées dans tous les traités classiques. On pourra se reporter pour plus de détails sur la structure des niveaux d'énergie à Cohen-Tannnoudji *et al.* [1973], structure fine : chapitre XII, effet Zeeman : complément $\mathrm{D_{VII}}$ et structure hyperfine : chapitre XII. Cohen-Tannnoudji [1992] contient un exposé très complet de la manipulation d'atomes par laser ; voir également Suter [1997].

# Chapitre 16

# Atomes complexes et et molécules

Ce chapitre est consacré aux atomes à plusieurs électrons et aux molécules. C'est un sujet qui peut devenir très complexe et où des règles empiriques doivent venir compléter la théorie. Aussi nous limiterons-nous à des situations relativement simples : atomes légers et molécules diatomiques. La section 16.1 traite des atomes à deux électrons, la section 16.2 développe le modèle en couches de l'atome et la section 16.3 examine les molécules diatomiques.

## 16.1 L'atome à deux électrons

### 16.1.1 L'état fondamental de l'atome d'hélium

L'atome d'hélium est un atome à deux électrons de charge $2q_e$, que nous écrivons sous la forme $Zq_e$, $Z = 2$, de sorte que notre exposé s'applique par exemple aussi à l'ion $\mathrm{Li}^+$ avec $Z = 3$. En supposant le noyau infiniment lourd (une approximation meilleure que 0.1 %), dans une représentation où l'opérateur de position est diagonal, le hamiltonien $H$ s'écrit

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\,\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \tag{16.1}$$

Le noyau est supposé fixé en $O$ et les vecteurs $\vec{r}_1$ and $\vec{r}_2$ sont les positions des électrons 1 et 2. Ce hamiltonien se décompose suivant $H = H_0 + W$, où $H_0$ est le hamiltonien qui prend en compte l'interaction des électrons avec le noyau

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\,\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} \tag{16.2}$$

et $W$ est un terme dont l'origine physique est la répulsion électrostatique entre les deux électrons que l'on peut essayer de traiter comme une perturbation

$$W = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \tag{16.3}$$

Cherchons le niveau de plus basse énergie en négligeant $W$. Ce niveau est manifestement un niveau $1s^2$, où les deux électrons sont dans un état $1s$ ; l'exposant compte le nombre d'électrons dans un état donné. Cependant, les électrons sont des fermions, et ces deux électrons ne peuvent pas être dans un même état. Heureusement, le spin sauve la mise, car les deux électrons peuvent être mis dans un état singulet de spin $\chi_s$ (9.126), qui est antisymétrique dans l'échange des deux électrons. Notre fonction d'onde espace+spin correctement antisymétrisée devient alors

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi = \varphi_{1s}(\vec{r}_1)\varphi_{1s}(\vec{r}_2)\chi_s = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right) \mathrm{e}^{-Zr_1/a_0}\, \mathrm{e}^{-Zr_2/a_0} \chi_s \tag{16.4}$$

L'énergie de l'état fondamental de l'hélium correspondant à cette fonction d'onde est $E_0^{(0)} = -8R_\infty \simeq -108.8$ eV, à comparer avec le résultat expérimental $E^{\text{exp}} = -79.0\,\text{eV}$. On observe que $E_0^{(0)}$ est inférieur à la valeur expérimentale d'environ 30 %. Cependant, nous avons négligé l'interaction répulsive $W > 0$ de $H$, et nous nous attendons à ce que ce terme fasse remonter notre résultat théorique. Faisant preuve d'optimisme, nous appliquons aveuglément la théorie des perturbations, bien qu'il n'y ait aucune bonne raison pour que $W$ puisse être considéré comme "petit" comparativement aux autres termes d'énergie potentielle dans $H_0$. Utilisant (15.6), nous calculons la correction du premier ordre à $E_0$ :

$$\Delta E = \langle \Psi | W | \Psi \rangle = \frac{Z^6 e^2}{\pi^2 a_0^6} \int \frac{\mathrm{e}^{-2Zr_1/a_0}\, \mathrm{e}^{-2Zr_2/a_0}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, \mathrm{d}^3 r_1 \mathrm{d}^3 r_2 \tag{16.5}$$

Pour calculer cette intégrale à six dimensions, nous nous servons de la représentation suivante[1] de $1/r$ :

$$\frac{1}{r} = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{k^2}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

et nous trouvons

$$\Delta E = \frac{Z^6 e^2}{2\pi^4 a_0^6} \int \frac{\mathrm{d}k}{k^2} \left[ \int \mathrm{e}^{-2Zr/a_0}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\, \mathrm{d}^3 r \right]^2$$

Le calcul de la transformée de Fourier dans l'expression de $\Delta E$ se fait en utilisant

$$\begin{aligned}
\int \mathrm{d}^3 r\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\, \mathrm{e}^{-\lambda r} &= 2\pi \int_0^\infty r^2\, \mathrm{d}r\, \mathrm{e}^{-\lambda r} \int_{-1}^{+1} \mathrm{e}^{\mathrm{i}qr\cos\theta} \mathrm{d}\cos\theta \\
&= \frac{2\pi}{q} \int_0^\infty r\, \mathrm{d}r\, \sin qr\, \mathrm{e}^{-\lambda r} = \frac{2\pi}{q}\, \mathrm{Im} \int_0^\infty r\, \mathrm{d}r\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}qr} \mathrm{e}^{-\lambda r} \\
&= \frac{4\pi}{q} \mathrm{Im}\, \frac{1}{(\lambda - \mathrm{i}q)^2} = \frac{8\pi\lambda}{(\lambda^2 + q^2)^2}
\end{aligned} \tag{16.6}$$

1. En effet, l'équation de Poisson $\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta(\vec{r})$ montre que $1/r$ a pour transformée de Fourier $4\pi/k^2$. On peut aussi calculer la transformée de Fourier de $(k^2+\alpha^2)^{-1}$ et prendre la limite $\alpha \to 0$.

ce qui donne

$$\int \mathrm{e}^{-2Zr/a_0}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\,\mathrm{d}^3r = \frac{16\pi Z/a_0}{[k^2+(2Z/a_0)^2]^2} \tag{16.7}$$

On reporte ce résultat dans l'expression de $\Delta E$

$$\Delta E = \frac{4Ze^2}{\pi a_0}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x}{(1+x^2)^4} = \frac{4Ze^2}{\pi a_0}\times\frac{5\pi}{32} = \frac{5}{4}\,Z\,R_\infty \tag{16.8}$$

où la dernière expression est spécifique à l'atome d'hélium. Comme on s'y attendait, $\Delta E$ est positif et

$$E_0^{(0)} + \Delta E \simeq -74.8\,\mathrm{eV} \tag{16.9}$$

ce qui est beaucoup plus proche du résultat expérimental que ce que nous pouvions raisonnablement espérer.

La méthode variationnelle va nous donner un résultat encore plus précis. Comme fonction d'onde d'essai à un électron, nous prenons

$$\varphi(\vec{r}) = \left(\frac{z^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-zr/a_0} \tag{16.10}$$

où $z$ est notre paramètre variationnel. Afin de calculer la valeur moyenne, nous partons de

$$\int \mathrm{d}^3r\,\varphi^*(\vec{r})\left(-\frac{1}{2m_e}\nabla^2 - \frac{ze^2}{r}\right)\varphi(\vec{r}) = -z^2R_\infty \tag{16.11}$$

parce que (16.10) donne l'état fondamental solution de l'équation de Schrödinger pour un atome à un électron dans un potentiel de Coulomb $-ze^2/r$. Comme l'énergie potentielle est le double de l'énergie totale, nous avons aussi

$$\int \mathrm{d}^3r\left(-\frac{ze^2}{r}\right)|\varphi(\vec{r})|^2 = -2ze^2R_\infty \tag{16.12}$$

Les équations (16.11) et (16.12) nous permettent de calculer la valeur moyenne de $H_0$ :

$$\langle H_0\rangle = -2(2zZ - z^2)R_\infty$$

La valeur moyenne de $W$ vient juste d'être déterminée dans l'approche perturbative

$$\langle W\rangle = \frac{5}{4}zR_\infty.$$

Rassemblant toutes les contributions, nous obtenons

$$E_0(z) = 2\left(z^2 - 2Zz + \frac{5}{8}\,z\right)R_\infty \tag{16.13}$$

La valeur optimale de $z$ se calcule à partir de $\mathrm{d}E(z)/\mathrm{d}z = 0$, ce qui conduit à $z = Z - 5/16$ et

$$E_0^{\mathrm{var}} = -2\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2 R_\infty \tag{16.14}$$

Dans le cas de l'hélium, nous trouvons $E_0^{\mathrm{var}} \simeq -77.5$ eV, ce qui est plus proche du résultat expérimental que l'estimation perturbative. Nous vérifions aussi que $E_0^{\mathrm{var}} > E_0^{\mathrm{exp}}$, en conformité avec la méthode variationnelle. Pour un même volume de calculs, nous observons que la méthode variationnelle avec un bon choix de la fonction d'onde d'essai donne des résultats nettement plus précis que la théorie des perturbations.

### 16.1.2 États excités de l'atome d'hélium

Ainsi que nous venons de le voir, l'état fondamental de l'atome d'hélium possède un moment angulaire orbital nul et un spin total nul. Nous utiliserons par la suite la notation standard ${}^{2S+1}L_J$, où $S$ est le spin total, $L$ le moment angulaire orbital total et $J$ le moment angulaire total ; l'état fondamental de l'atome d'hélium est donc un état ${}^1S_0$. Les niveaux d'énergie situés immédiatement au-dessus du fondamental sont les niveaux $1s^12s^1$ : un électron dans l'état $1s$ et un autre dans l'état $2s$, et $1s^12p^1$ : un électron dans l'état $1s$ et un autre dans l'état $2p$. Ces niveaux sont dégénérés si $H_0$ (16.2) est utilisé comme hamiltonien. Cependant, une meilleure stratégie consiste à prendre en compte, au moins de façon approchée, l'effet de la répulsion électrostatique $W$ (16.3) en utilisant non pas le potentiel de Coulomb $-Ze^2/r$, mais un potentiel *effectif* à un électron $V_{\mathrm{eff}}(r)$ qui peut être déterminé à partir d'arguments de type Hartree-Fock (*cf.* le § 14.3.4). Par conséquent, au lieu de $H_0$, nous utiliserons un hamiltonien $H_0'$ :

$$H_0' = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2 + V_{\mathrm{eff}}(r_1) + V_{\mathrm{eff}}(r_2) \tag{16.15}$$

et au lieu de $W$ une perturbation $W'$ :

$$W' = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \left(-\frac{Ze^2}{r_1} - V_{\mathrm{eff}}(r_1)\right) + \left(-\frac{Ze^2}{r_2} - V_{\mathrm{eff}}(r_2)\right) \tag{16.16}$$

Avec $H_0'$ comme hamiltonien, les niveaux $2s$ et $2p$ ne sont plus dégénérés (voir la figure 10.7 ou la figure 16.2), et le niveau $2p$ se trouve au-dessus du niveau $2s$. Une remarque importante est que $W'$ est invariant par rotation, et il commute donc avec le moment angulaire orbital *total* $\vec{L}$ : $[\vec{L}, W'] = 0$, bien que, par exemple, $[\vec{L}_1, W'] \neq 0$. $W'$ n'a pas d'éléments de matrice non nuls entre les niveaux $1s^12s^1$ et $1s^12p^1$ qui ont des moments angulaires orbitaux différents, $L = 0$ et $L = 1$, respectivement. Ainsi, et bien que ces niveaux ne soient pas très loin de la dégénérescence, nous pouvons utiliser la théorie des perturbations non dégénérée.

Commençons par le niveau $1s^1 2s^1$, qui est le premier niveau excité. Nous pouvons construire des fonctions d'onde symétriques et antisymétriques

$$\Psi_\pm(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\varphi_{1s}(\vec{r}_1)\varphi_{2s}(\vec{r}_2) \pm \varphi_{1s}(\vec{r}_2)\varphi_{2s}(\vec{r}_1)\big) \tag{16.17}$$

Les contributions au calcul perturbatif des termes à un électron de $W'$ (16.16) sont indépendantes du caractère de symétrie de $\Psi$, mais la contribution de $W$ dépend de ce caractère

$$\begin{aligned}\langle \Psi_\pm | W | \Psi_\pm \rangle &= e^2 \int \mathrm{d}^3 r_1\, \mathrm{d}^3 r_2 \frac{|\varphi_{1s}(\vec{r}_1)|^2 |\varphi_{2s}(\vec{r}_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \\ &\pm e^2 \int \mathrm{d}^3 r_1\, \mathrm{d}^3 r_2\, \varphi_{1s}(\vec{r}_1)\varphi_{2s}(\vec{r}_2) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, \varphi_{1s}(\vec{r}_2)\varphi_{2s}(\vec{r}_1) = K \pm J\end{aligned} \tag{16.18}$$

L'intégrale $K$ est manifestement positive, et on peut montrer que $J$, appelée *intégrale d'échange* (*cf.* § 14.3.4), est aussi positive, de sorte que l'énergie de la fonction d'onde antisymétrique est plus basse que celle de l'état symétrique. Ceci se comprend aisément : comme la fonction d'onde antisymétrique s'annule à $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$, dans le calcul de la valeur moyenne de $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^{-1}$, l'intégrand est maximal (et en fait infini) à $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$, et la valeur moyenne est plus basse dans le cas antisymétrique que dans le cas symétrique. Ces considérations sont entièrement indépendantes du caractère fermionique des électrons, et seraient valables si les électrons de l'atome d'hélium étaient différents, un électron rouge et un électron vert. Ce que le principe de Pauli implique, c'est que *la symétrie de la fonction d'onde d'espace est liée à celle de la fonction d'onde de spin*, et par conséquent le niveau le plus bas est un niveau ${}^3S_1$, et le niveau le plus élevé un niveau ${}^1S_0$ (figure 16.1a). Si un des électrons était rouge et l'autre vert, le spin total ne serait pas lié à la symétrie de la fonction d'onde d'espace.

Dans l'état $1s^1 2p^1$, le moment angulaire orbital total est $L = 1$ et les états possibles sont ${}^1P_1$ dans l'état singulet de spin, et ${}^3P_0$, ${}^3P_1$, et ${}^3P_2$ dans l'état triplet de spin. L'intégrale d'échange est à nouveau positive de sorte que les états triplets sont situés au-dessous de l'état singulet. Le schéma des niveaux est donné sur la figure 16.1b.

## 16.2 Modèle en couches de l'atome

### 16.2.1 Potentiel effectif

Cette section est consacrée à la structure des atomes complexes. C'est un sujet qui combine une approche théorique (résolution de l'équation de Schrödinger) et une approche semi-empirique, car il n'est pas possible de résoudre de façon exacte l'équation de Schrödinger lorsque le nombre d'électrons $Z \gg 1$.

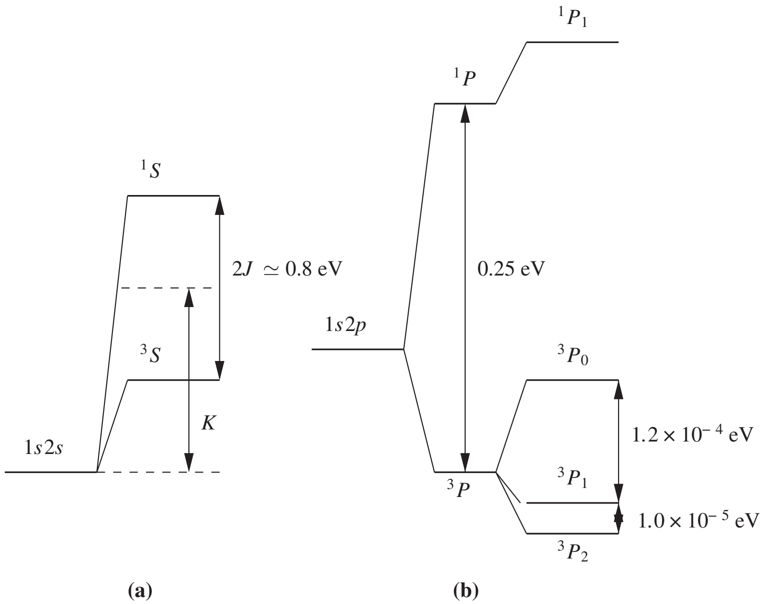



FIG. 16.1 – Les deux premiers niveaux excités de l'atome d'hélium. (a) Niveau $1s^12s^1$. (b) Niveau $1s^12p^1$. D'après Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément $B_{XIV}$.

Considérons donc un atome à $Z$ électrons à l'approximation du noyau infiniment lourd, une approximation meilleure que 0.1 %. Le hamiltonien est facile à écrire

$$H = \sum_{i=1}^{Z} \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 \right) - \sum_{i=1}^{Z} \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{16.19}$$

Le noyau est suposé fixe à l'origine des coordonnées et $\vec{r}_i$ est la position de l'électron $i$. Le premier terme représente l'énergie cinétique, le second l'énergie potentielle d'interaction des électrons avec le noyau et le troisième la répulsion électrostatique entre les électrons. Comme dans le cas de l'atome d'hélium, on pourrait tenter de traiter ce terme en théorie des perturbations, mais une évaluation d'ordre de grandeur montre que cette approche est vouée à l'échec. En effet, en supposant $|\vec{r}_i| \sim |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \sim r$, $r$ étant une distance moyenne entre les électrons et le noyau, on constate que le rapport de l'énergie moyenne du troisième terme de (16.19) au second est $\sim Z(Z-1)/2Z \simeq 1/2$ si $Z \gg 1$. Comme dans le cas de l'hélium, nous allons admettre qu'en première approximation chaque électron se déplace dans un potentiel moyen à symétrie sphérique $V_{\text{eff}}(r_i)$ créé par le noyau et les $(Z-1)$ autres électrons, ce potentiel étant déterminé par des considérations auto-cohérentes de type Hartree-Fock

(§ 14.3.4). On récrit le hamiltonien (16.19) comme

$$\begin{aligned} H = H_0 + W &= \sum_{i=1}^{Z}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2\right) + \sum_{i=1}^{Z} V_{\rm eff}(r_i) \\ &+ \left[-\sum_{i=1}^{Z}\frac{Ze^2}{|\vec{r}_i|} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i=1}^{Z} V_{\rm eff}(r_i)\right] \end{aligned} \tag{16.20}$$

l'idée étant que la deuxième ligne de (16.20) (le terme $W$) peut être traitée en perturbation. Sans faire de calculs, on peut estimer le comportement de $V_{\rm eff}(r)$ pour $r \to 0$ et $r \to \infty$. En effet, pour $r \to 0$, en raison du théorème de Gauss, la seule charge à prendre en compte est celle du noyau, tandis que pour $r \to \infty$, un électron ne voit plus qu'une charge $[Z-(Z-1)]|q_e| = |q_e|$

$$r \to 0 \quad : \quad V_{\rm eff}(r) \simeq -\frac{Ze^2}{r} \qquad\qquad r \to \infty \quad : \quad V_{\rm eff}(r) \simeq -\frac{e^2}{r} \tag{16.21}$$

Nous allons négliger la seconde ligne de (16.20), en supposant que le potentiel $V_{\rm eff}$ tient compte suffisamment bien des interactions entre électrons : nous adoptons donc un modèle de $Z$ électrons *indépendants* dans le potentiel $V_{\rm eff}$. La connaissance approchée de $V_{\rm eff}(r)$ permet de déterminer les niveaux d'énergie, dont les 8 premiers sont donnés sur la figure 16.2. En fait, en raison du caractère approché de $V_{\rm eff}(r)$, la situation devient plus confuse au-delà de ces niveaux, et la théorie doit être complétée par des considérations empiriques. Chaque niveau de moment angulaire orbital $l$ peut accueillir $2(2l+1)$ électrons. Comme dans le cas de l'hélium, on porte en exposant le nombre d'électrons dans le niveau : par exemple, $3d^5$ représente une configuration comprenant 5 électrons dans un état de nombre quantique principal $n=3$ et de moment angulaire orbital $l=2$. La notation générale est donc $nl^x$, où $x$ est le nombre d'électrons dans le niveau $(n,l)$. Lorsqu'un niveau d'énergie contient le nombre maximum $2(2l+1)$ d'électrons, par exemple $3d^{10}$, on dit que l'on a affaire à une *couche complète*. Lorsqu'un atome est formé uniquement de couches complètes et que la différence d'énergie avec la couche immédiatement supérieure est importante, il devient difficile pour un électron de passer dans un niveau supérieur, et l'atome est peu actif chimiquement et difficile à ioniser : ce sera un *gaz rare*. Pour les atomes qui ne sont pas trop complexes, ceci se produit quand le nombre quantique principal augmente d'une unité. Les gaz rares sont l'hélium, le néon, l'argon, le krypton, et le xénon, et les configurations électroniques des premiers gaz rares sont

$$\begin{aligned} &\mathrm{He}\ :\ 1s^2 \quad \mathrm{Ne}\ :\ 1s^2 2s^2 2p^6 \quad \mathrm{Ar}\ :\ 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 \\ &\mathrm{Kr}\ :\ 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 \end{aligned}$$

Les alcalins (lithium, sodium, potassium, rubidium) sont formés de couches complètes et d'un électron $s$ supplémentaire, et leurs configurations électro-

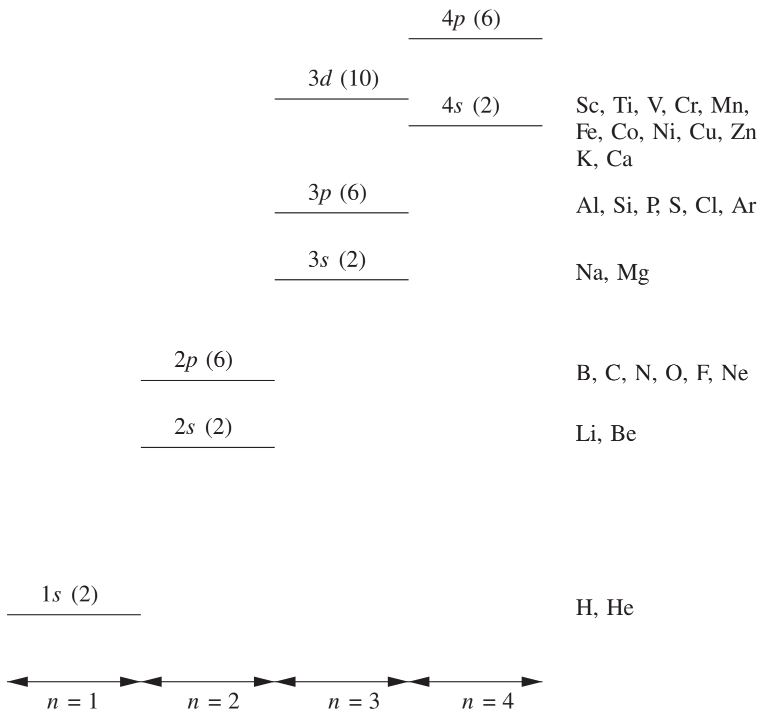



FIG. 16.2 – Les huit premiers niveaux du modèle en couches de l'atome. Les nombres entre parenthèses donnent le nombre maximum d'électrons dans le niveau.

niques sont

$$\text{Li} \;:\; 1s^2 2s^1 \qquad \text{Na} \;:\; 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 \qquad \text{K} \;:\; 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$$
$$\text{Rb} \;:\; 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1$$

Les propriétés chimiques des alcalins sont contrôlées par cet électron externe, les électrons des couches internes ne jouant essentiellement aucun rôle. Les alcalins ont un faible potentiel d'ionisation et sont très actifs chimiquement, car ils perdent facilement leur électron externe. Les halogènes (fluor, chlore, brome, iode) sont également chimiquement très actifs car ils capturent facilement un électron pour compléter leur couche externe $np^5$, à laquelle il manque juste un électron.

### 16.2.2 Couplage spin-orbite

En raison du principe de Pauli, le vecteur d'état des électrons dans une configuration électronique doit être complètement antisymétrique, et pour une couche complète, cela implique $\vec{J} = \vec{L} = \vec{S} = 0$, où $\vec{J}$, $\vec{L}$ et $\vec{S}$ sont respective-

ment le moment angulaire total de la couche, son moment angulaire orbital total et son spin total[2]. Les moments angulaires des atomes sont donc portés par les électrons de la couche externe, ou *électrons de valence.* Toutes les propriétés de l'atome : réactivité chimique, potentiel d'ionisation, etc. vont dépendre pour l'essentiel de ces électrons externes. Ainsi que nous l'avons déjà mentionné, c'est la raison pour laquelle un alcalin est, en première approximation, un atome à un électron dans le potentiel créé par le noyau et les $(Z-1)$ électrons des couches internes.

La structure fine due au couplage spin-orbite (15.20) va également jouer un rôle dans la description de l'atome. Soit un atome à $N$ électrons *externes*, $\vec{L}$ leur moment angulaire orbital total

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \cdots + \vec{L}_N$$

$\vec{S}$ leur spin total

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \cdots + \vec{S}_N$$

et $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ leur moment angulaire total. L'invariance par rotation implique la conservation de $\vec{J}$, et un état de $N$ électrons sera donc étiqueté $|JM\rangle$. En l'absence de couplage spin-orbite, le hamiltonien (16.20) ne dépend pas des variables de spin et les degrés de liberté orbitaux et de spin sont découplés : $\vec{L}$ et $\vec{S}$ sont séparément conservés. Lorsque l'on introduit le couplage spin-orbite, deux cas simples peuvent se présenter : soit l'effet du couplage spin-orbite est faible par rapport à celui de la "perturbation" $W$ (deuxième ligne de (16.20)), $H_{\rm so} \ll W$, et dans ce cas, $\vec{L}$ et $\vec{S}$ sont approximativement conservés, soit $H_{\rm so} \gg W$ et dans ce cas, ce sont les moments angulaires *individuels* $\vec{\jmath}$ des électrons qui sont approximativement conservés. Le premier cas se présente pour les atomes qui ne sont pas trop lourds, et il est appelé *couplage de Russell-Saunders*, et le second cas est appelé couplage[3] $j-j$, les cas intermédiaires étant évidemment possibles. Nous nous limitons dans la suite de la discussion aux atomes légers, et donc au couplage de Russell-Saunders. La *règle de Hund* (empirique) stipule que l'énergie la plus basse correspond (1) à la plus grande valeur de $S$ et (2) à la plus grande valeur de $L$ compatible avec celle de $S$ et avec le principe de Pauli : si les états sont étiquetés $^{2S+1}L_J$ comme au § 16.1.2, l'état fondamental correspondra à $S = S_{\rm max}$ et à $L = L_{\rm max}$. Cette règle de Hund peut se comprendre comme résultant de la minimisation de l'énergie d'échange, mais il est difficile d'en donner une formulation quantitative.

Donnons comme exemple le cas du carbone, atome à 6 électrons, dont la configuration électronique est $1s^2 2s^2 2p^2$. Les couches complètes sont $1s^2$ et

2. En effet, si l'état d'un électron est caractérisé par les nombres quantiques magnétiques orbital $m_l$ et de spin $m_s$, le couple $(m_l, m_s)$ doit être différent pour chaque électron, ce qui implique que $m_L = \sum_{i=1}^{2(2l+1)} m_{li} = 0$ et $m_S = \sum_{i=1}^{2(2l+1)} m_{li} = 0$. Comme l'axe de quantification du moment angulaire est arbitraire, ce résultat vaut pour toute direction de quantification, et ceci implique que $L = S = 0$.

3. Ce couplage est dominant dans le modèle en couches du noyau atomique : exercice 16.4.4.

$2s^2$, et la configuration à étudier est donc $2p^2$. En l'absence du principe de Pauli, il y aurait $4 \times (2l+1) = 36$ états possibles. Le principe de Pauli réduit ce nombre à $C_6^2 = 15$ états possibles. Les deux spins peuvent se combiner pour former les états de spin total $S = 0$ et $S = 1$, et les états de moment angulaire $l = 1$ peuvent se combiner pour former des états de moment angulaire orbital total $L = 0\,(S)$, $L = 1\,(P)$ et $L = 2\,(D)$. Les états $S$ et $D$ sont symétriques d'espace et l'état $P$ est antisymétrique. Les combinaisons autorisées par le principe de Pauli sont, pour $S = 0$ : ${}^1S_0$ et ${}^1D_2$, et pour $S = 1$ : ${}^3P_0$, ${}^3P_1$ et ${}^3P_2$. On retrouve bien $1+5+1+3+5 = 15$ états possibles, et d'après les deux premières règles de Hund, l'état fondamental est un état ${}^3P$. La troisième règle de Hund énonce que l'état fondamental pour une couche comprenant moins de $(2l+1)$ électrons correspond à la valeur minimale de $J$, et à la valeur maximale quand le nombre d'électrons est supérieur à $(2l+1)$. Cette troisième règle de Hund peut se déduire de la minimisation de l'énergie due au couplage spin-orbite. L'état fondamental du carbone est donc ${}^3P_0$.

L'atome d'oxygène (8 électrons) correspond à une configuration électronique $1s^22s^22p^4$ : il manque deux électrons pour former une couche complète. L'absence d'un électron se comporte comme une particule de spin 1/2 (un trou en physique du solide), et les valeurs possibles de $S$, $L$ et $J$ sont les mêmes que pour le carbone. Cependant, la troisième règle de Hund entraîne que l'état fondamental est cette fois ${}^3P_2$.

## 16.3 Molécules diatomiques

### 16.3.1 Fonctions d'onde électroniques

La théorie des molécules est fondée sur *l'approximation de Born-Oppenheimer*, qui repose sur l'observation suivante : par conservation de l'impulsion pour une molécule isolée, les impulsions électroniques sont du même ordre de grandeur que les impulsions des noyaux atomiques, $p_{\rm el} \sim p_{\rm noy}$, et par conséquent le rapport des vitesses est l'inverse de celui des masses

$$v_{\rm el} \sim \left(\frac{m_{\rm noy}}{m_{\rm el}}\right) v_{\rm noy} \gg v_{\rm noy}$$

Le mouvement des électrons est beaucoup plus rapide que celui des noyaux, et en première approximation nous pouvons supposer que les électrons se déplacent dans un potentiel créé par des noyaux que l'on peut considérer comme fixes. Selon la terminologie introduite dans la section 12.6, *les électrons suivent adiabatiquement le mouvement des noyaux.* Les corrections à cette approximation seront examinées dans la sous-section suivante. Le potentiel créé par les noyaux est fonction de leur disposition dans l'espace, et comme nous allons nous limiter aux molécules diatomiques, la configuration des noyaux sera entièrement déterminée par la distance $r$ entre les deux noyaux : le potentiel créé par les noyaux dépend uniquement du paramètre $r$. On peut

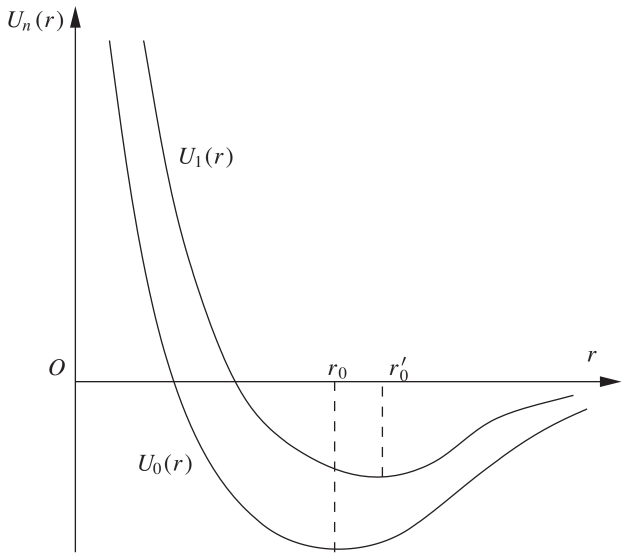



FIG. 16.3 – Les deux premières courbes d'énergie électronique $U_0(r)$ et $U_1(r)$ d'une molécule diatomique. En raison de la répulsion électrostatique des noyaux et du principe de Pauli, le potentiel est répulsif à courte distance, approximativement en $1/r^{12}$. À longue distance, il est contrôlé par les forces de van der Waals et se comporte en $1/r^6$.

alors résoudre (en théorie !) l'équation de Schrödinger pour les électrons dans ce potentiel et obtenir les niveaux d'énergie électroniques $U_0, U_1, \cdots, U_n, \cdots$ comme fonctions de $r$. Le phénomène de répulsion (ou de non croisement) des niveaux (§ 5.3.2 et exercice 16.4.2) implique que les diverses courbes $U_0(r)$, $U_1(r), \cdots, U_n(r) \cdots$ ne se croisent pas si les symétries des fonctions d'onde électroniques des deux niveaux sont identiques[4], et on peut tracer qualitativement les courbes représentatives (figure 16.3). $U_n(r)$ est l'énergie de la molécule dans son niveau électronique $n$ lorsque les deux noyaux sont à distance $r$ et que l'on néglige leur énergie cinétique. La courbe $U_0(r)$ présente un minimum à $r = r_0$, et cette valeur de $r$ correspond à l'état fondamental de la molécule : $|U_0(r_0)|$ est l'énergie de dissociation de la molécule en atomes. Si la molécule passe de $U_0(r)$ à $U_1(r)$, elle passe dans un niveau électronique excité, la différence d'énergie étant de l'ordre de quelques eV. En plus des niveaux électroniques, une molécule diatomique (comme toute molécule) possède des niveaux de rotation et des niveaux de vibration. En effet, les noyaux peuvent vibrer autour de la position d'équilibre $r = r_0$ sur la droite joignant les deux noyaux, ou *droite des noyaux*, et ils peuvent aussi tourner autour d'un axe

4. En anticipant sur les définitions qui vont suivre, des termes de $|\Lambda|$ différent ou des termes $\Sigma^+$ et $\Sigma^-$ ont des symétries différentes. Dans ce cas, les éléments de matrice non diagonaux du hamiltonien dans l'exercice 16.4.2 sont nuls.

perpendiculaire à la droite des noyaux avec un moment d'inertie $I = Mr_0^2$, où $M$ est la masse réduite. Comme la différence entre deux niveaux électroniques ($\sim 1\,\mathrm{eV}$) est grande par rapport aux niveaux de vibration ($\sim 10^{-1}\,\mathrm{eV}$) et de rotation ($\sim 10^{-3}\,\mathrm{eV}$), on peut négliger en première approximation le couplage entre niveaux de rotation-vibration et niveaux électroniques.

Examinons maintenant les symétries de la molécule. Contrairement au cas des atomes, nous n'avons plus pour les électrons une symétrie sphérique, mais uniquement une symétrie axiale, celle des rotations autour de la droite des noyaux prise comme axe $Oz$. Si nous négligeons la structure fine, $\vec{L}$ et $\vec{S}$ sont découplés, et $\vec{S}$, qui est indépendant du mouvement orbital, est conservé. Le seul effet du spin est de conduire à une dégéréresence $2S + 1$ de chaque niveau. En revanche, en ce qui concerne le moment angulaire orbital, seul $L_z$ est conservé : nous appellerons $\Lambda$ la valeur propre de $L_z$

$$\Lambda = \cdots, -2, -1, 0, 1, 2, \cdots$$

La réflexion par rapport à un plan passant par la droite des noyaux est aussi une symétrie de la molécule, qui permet de relier $-\Lambda$ et $\Lambda$ : en effet, dans cette symétrie, $\vec{L} \to -\vec{L}$, $\Lambda \to -\Lambda$, et les états $-\Lambda$ et $\Lambda$ sont dégénérés[5], sauf évidemment si $\Lambda = 0$. La première caractéristique de la molécule est la valeur de $|\Lambda|$, et on notera $\Sigma$ un état $\Lambda = 0$, $\Pi$ un état $|\Lambda| = 1$, $\Delta$ un état $|\Lambda| = 2$, etc.[6]. Nous aurons donc le tableau

| $\|\Lambda\|$ | 0 | 1 | 2 | 3 ... |
|---|---|---|---|---|
| État | $\Sigma$ | $\Pi$ | $\Delta$ | $\Phi$ ... |

Lorsque $\Lambda = 0$, la fonction d'onde électronique est soit paire $(+)$ , soit impaire $(-)$ par réflexion, et les deux états possibles seront notés

$$^{2S+1}\Sigma^+ \qquad \text{et} \qquad ^{2S+1}\Sigma^-$$

Lorsque les deux noyaux sont identiques, c'est-à-dire qu'ils ont la même charge électrique, mais ne sont pas nécessairement les mêmes isotopes, le milieu $O$ de la droite des noyaux est un centre de symétrie du potentiel vu par les électrons, et le hamiltonien des *électrons* est invariant dans une inversion des coordonnées $\vec{r}_i \to -\vec{r}_i$. Cette inversion des coordonnées commute avec le moment angulaire orbital, et on peut donc caractériser un état électronique par $\Lambda$ et sa parité dans l'inversion des coordonnées. Dans cette opération, la fonction d'onde peut être paire $(g)$ ou impaire $(u)$. Les états $\Sigma$ possibles seront donc

$$^{2S+1}\Sigma_g^+ \qquad ^{2S+1}\Sigma_u^+ \qquad ^{2S+1}\Sigma_g^- \qquad ^{2S+1}\Sigma_u^-$$

5. Toutefois, l'interaction avec le noyau lève la dégénérescence, mais l'effet est en $(m_{\mathrm{el}}/m_{\mathrm{noy}})^{2|\Lambda|}$.

6. En suivant la notation de spectroscopie atomique, on remplace donc les lettres latines minuscules $s, p, d, f, \ldots$ par les lettres grecques majuscules correspondantes : $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \ldots$

En pratique, la situation se simplifie : on constate empiriquement que l'immense majorité des molécules possède un état fondamental $S = 0$ et une symétrie spatiale maximale[7]. Les deux états fondamentaux usuels sont donc

$$\text{Noyaux différents} \quad : \quad {}^1\Sigma^+ \qquad\qquad \text{Noyaux identiques} \quad : \quad {}^1\Sigma_g^+$$

### 16.3.2 Niveaux de rotation-vibration

Nous avons supposé pour le moment les noyaux immobiles. Nous allons maintenant prendre en compte le mouvement des noyaux, à configuration électronique fixée, en général $U_0(r)$. Soit $\vec{K}$ le moment angulaire *total* de la molécule : comme la symétrie d'ensemble est une symétrie de rotation, $\vec{K}$ est conservé. Si $\vec{J}$ est le moment angulaire des noyaux, et que nous choisissions le cas usuel $\vec{S} = 0$ afin de simplifier la discussion, nous aurons $\vec{K} = \vec{J} + \vec{L}$. Le moment d'inertie de la molécule pour un axe de rotation perpendiculaire à la droite des noyaux est $I = Mr^2$, où $M$ est la masse réduite, et ce moment d'inertie est très grand par rapport au moment d'inertie $I'$ pour des rotations autour de la droite des noyaux. L'énergie de rotation $\vec{J}^{\,2}/2I'$ pour de telles rotations serait très importante et les niveaux correspondants sont inobservables en pratique. Il reste donc les rotations autour d'un axe perpendiculaire à la droite des noyaux, dont l'énergie de rotation est

$$E_{\text{rot}} = \frac{\vec{J}^{\,2}}{2Mr^2} = \frac{(\vec{K} - \vec{L})^2}{2Mr^2} \tag{16.22}$$

Il faut maintenant prendre dans (16.22) la moyenne sur le mouvement électronique rapide

$$\langle(\vec{K} - \vec{L})^2\rangle = K(K+1) + \langle\vec{L}^{\,2} - 2\vec{K}\cdot\vec{L}\rangle$$

Comme $L_z$ possède une valeur fixée $L_z = \Lambda$, les valeurs moyennes de $L_x$ et de $L_y$ sont nulles : $\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$. La valeur moyenne de $\vec{L}$ est donc dirigée suivant $Oz$, ce que l'on peut écrire

$$\langle\vec{L}\rangle = \Lambda\hat{z}$$

Le moment angulaire $\vec{J}$ des noyaux est perpendiculaire à la droite des noyaux, soit

$$\langle\vec{J}\cdot\hat{z}\rangle = \langle(\vec{K} - \vec{L})\rangle\cdot\hat{z} = 0 \Longrightarrow \langle\hat{z}\cdot\vec{K}\rangle = \langle\hat{z}\cdot\vec{L}\rangle = \Lambda$$

La projection de $\langle\vec{K}\rangle$ sur l'axe de la molécule est donc aussi égale à $\Lambda$, ce qui implique $K \geq |\Lambda|$ et finalement

$$\langle(\vec{K} - \vec{L})^2\rangle = K(K+1) + \langle\vec{L}^{\,2}\rangle - 2\Lambda^2$$

7. Deux exceptions importantes sont la molécule $O_2$, dont l'état fondamental est ${}^3\Sigma_g^-$ (ce qui est à l'origine du paramagnétisme de l'oxygène) et NO, dont le fondamental est un état ${}^2\Pi$.

d'où l'expression de l'énergie de rotation

$$E_{\text{rot}} = \frac{K(K+1)}{2Mr^2} + \text{cste} \tag{16.23}$$

Dans cette équation, la constante ne dépend que du mouvement électronique, et ne contient pas $K$. Dans le cas particulier $\Lambda = 0$ (état $\Sigma$), on a $\langle \vec{K}^2 \rangle = \langle \vec{J}^2 \rangle$ ; en première approximation $r = r_0$ et on trouve alors la forme habituelle de l'énergie de rotation du rotateur sphérique rigide (§ 9.3.1)

$$E_{\text{rot}} = \frac{J(J+1)}{2Mr_0^2} \tag{16.24}$$

Passons maintenant au mouvement de vibration le long de la droite des noyaux. L'énergie potentielle $U_0(r)$ peut être approchée au voisinage de $r = r_0$ par un potentiel harmonique

$$U_0(r) \simeq U_0(r_0) + \frac{1}{2}U_0''(r_0)(r-r_0)^2 = U_0(r_0) + \frac{1}{2}M\omega_{\text{vib}}^2 \tag{16.25}$$

la fréquence de vibration $\omega_{\text{vib}}$ étant donnée par

$$\omega_{\text{vib}} = \sqrt{\frac{U_0''(r_0)}{M}} \tag{16.26}$$

Les niveaux de vibration sont donnés par (10.14)

$$E_{\text{vib}}^n = \hbar\omega_{\text{vib}}\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad n = 0, 1, 2 \cdots \tag{16.27}$$

Les niveaux de rotation-vibration d'une molécule diatomique dans son état électronique fondamental sont finalement de la forme

$$\boxed{E(n,J) = U_0(r_0) + \hbar\omega_{\text{vib}}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{J(J+1)}{2Mr_0^2}} \tag{16.28}$$

Cette formule ne donne qu'une première approximation : lorsque la molécule vibre, la distance entre les noyaux n'est plus $r_0$ mais $r$, ce qui entraîne un couplage entre rotation et vibration (voir par exemple Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément $\text{A}_\text{V}$).

## 16.4 Exercices

### 16.4.1 États $np^3$ permis

Trouver les configurations permises pour 3 électrons dans un état $np$ ($l = 1$), ou état $np^3$. Suggestions (1) Quelles sont les valeurs possibles de $S$, $L$ et $J$ et quelles sont les combinaisons ${}^{2S+1}L_J$ autorisées par le principe de Pauli ? (2) Déterminer le nombre de couples possibles $(m_L, m_S)$ et retrouver le résultat de cette manière. Utiliser les règles de Hund pour montrer que le niveau fondamental est ${}^4S_{3/2}$.

### 16.4.2 Théorème de non croisement des niveaux

Supposons que deux courbes d'énergie électronique d'une molécule diatomique $U_1(r)$ et $U_2(r)$ soient très proches pour des valeurs de $r$ voisines de $\overline{r}$. En se limitant à ces deux niveaux, on écrit le hamiltonien

$$H(r) \simeq H(\overline{r}) + \delta r \frac{\partial H}{\partial r} = H_0 + W \qquad \delta r = r - \overline{r}$$

Soit $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ les fonctions propres de $H_0$ avec les valeurs propres $U_1(\overline{r}) = U_1$ et $U_2(\overline{r}) = U_2$, et $W_{ij} = \langle\varphi_i|W|\varphi_j\rangle\, i,j = 1, 2$. Montrer que la condition de croisement des niveaux est

$$U_1 - U_2 = W_{22} - W_{11} \qquad W_{12} = 0$$

Pourquoi ne peut-on satisfaire simultanément ces deux conditions si les symétries des deux fonctions d'onde sont les mêmes ?

### 16.4.3 Structure hyperfine du deutérium

Un noyau atomique comprend $Z$ protons et $N$ neutrons, appelés collectivement nucléons. Le proton et le neutron possèdent un moment magnétique $\vec{\mu}$ proportionnel à leur spin $\vec{S}$

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$$

où $\gamma$ est le facteur gyromagnétique

$$\gamma_p = 5.59\,\frac{q_p}{2m_p} \qquad \gamma_n = -3.83\,\frac{q_p}{2m_p} \tag{16.29}$$

$m_p$ est la masse du proton et $q_p = -q_e$ sa charge. Le magnéton de Bohr nucléaire $\mu_N$ est défini par

$$\mu_N = \frac{q_p \hbar}{2m_p}$$

**1.** Justifier la définition suivante de l'opérateur moment magnétique $\vec{\mu}$ d'un noyau

$$\vec{\mu} = \sum_{i=1}^{Z}(\gamma_l \vec{L}_i + \gamma_p \vec{S}_i) + \sum_{j=1}^{N} \gamma_n \vec{S}_j \tag{16.30}$$

où $\gamma_l = q_p/2m_p$. $\vec{L}_i$ et $\vec{S}_i$ représentent le moment angulaire orbital et le spin du proton $i$, et $\vec{S}_j$ le spin du neutron $j$.

**2.** Soit $J$, le moment angulaire *total* du noyau (aussi appelé *spin du noyau*), et $|JM\rangle$ son état de moment angulaire : $M$ est le nombre quantique magnétique. On appelle par convention moment magnétique du noyau $\mu$, la valeur de $\mu_z$ dans l'état $|J, M = J\rangle$

$$\mu = \langle J, M = J| \left[\sum_{i=1}^{Z}(\gamma_l \vec{L}_{iz} + \gamma_p \vec{S}_{iz}) + \sum_{j=1}^{N} \gamma_n \vec{S}_{jz}\right] |J, M = J\rangle \tag{16.31}$$

Utiliser le théorème de Wigner-Eckart (10.150) pour montrer

$$\langle jm|V_z|jm'\rangle = \frac{m}{\hbar j(j+1)}\,\langle \vec{J}\cdot\vec{V}\rangle\delta_{mm'} \tag{16.32}$$

où $\vec{V}$ est un opérateur vectoriel.

**3.** Le deutéron est formé d'un proton et d'un neutron qui se trouvent dans un état ${}^3S_1$. Le deutéron est en fait un mélange de ${}^3S_1$ et de ${}^3D_1$, mais nous ignorerons la (petite) composante ${}^3D_1$. En déduire la valeur du moment magnétique du deutéron : $\mu_D = 0.88\mu_N$, ce qui est en bon accord avec la valeur expérimentale $\mu_D^{\rm exp} = 0.86\mu_N$. Montrer que l'on peut écrire l'opérateur moment magnétique dipolaire du deutéron en fonction de son spin $\vec{S}_D$

$$\vec{\mu}_D = 0.86\left(\frac{q_P}{2m_p}\right)\vec{S}_D = \gamma_D\vec{S}_D$$

**4.** L'électron de l'atome de deutérium dans son état fondamental interagit avec le moment magnétique du deutéron suivant une interaction effective (15.30)

$$W = -\frac{2\mu_0}{3}\,\gamma_D\gamma_e(\vec{S}_D\cdot\vec{S}_e)\delta(\vec{r}\,)$$

où $\mu_0$ est la perméabilité du vide, $\gamma_e$ le facteur gyromagnétique de l'électron et $\vec{S}_e$ son spin. Montrer que la moyenne spatiale de cette interaction transforme celle-ci en couplage effectif des deux spins

$$\langle W\rangle = \frac{A_D}{\hbar^2}\,(\vec{S}_D\cdot\vec{S}_e)$$

Calculer le rapport $A_D/A$, où $A$ est la constante (15.32) obtenue pour l'hydrogène, et donner la valeur de $A_D$ en eV.

**5.** Soit $\vec{F} = \vec{S}_D + \vec{S}_e$, le moment angulaire total de *l'atome* dans son état fondamental. Quelles sont les deux valeurs possibles de $F$ ? Déterminer l'énergie des deux niveaux hyperfins en fonction de $A_D$ et leur dégénérescence.

**6.** L'atome de deutérium est plongé dans un champ magnétique $\vec{B}$ parallèle à $Oz$, $B_z = B > 0$. Écrire la perturbation $W$ due à l'interaction de l'atome avec le champ magnétique, en remarquant que $M_D \gg m_e$. Montrer que les éléments de matrice de $W$ dans la base $|F, m_F\rangle$ sont de la forme

$$W_{m_F m_F'} = -\frac{q_e B}{m_e}\,\frac{\hbar m_F}{2F(F+1)}\left[F(F+1) - \frac{5}{4}\right]\delta_{m_F m_F'}$$

Tracer qualitativement les niveaux d'énergie en fonction de $B$. Quelle condition doit-on avoir sur $B$ pour que les niveaux d'énergie soient donnés correctement par la formule précédente ?

### 16.4.4 Modèle en couches du noyau atomique

Dans le modèle en couches du noyau atomique, on suppose que chaque nucléon se déplace dans un potentiel moyen créé par les autres nucléons. Ce potentiel est empiriquement assez proche du potentiel d'un oscillateur harmonique à trois dimensions de fréquence $\omega$, et l'ordre des niveaux est donné sur la figure 16.4, en prenant l'état fondamental comme zéro d'énergie. On remarquera la différence de notations entre la physique nucléaire et la physique atomique, celles de la physique nucléaire étant d'ailleurs plus logiques.

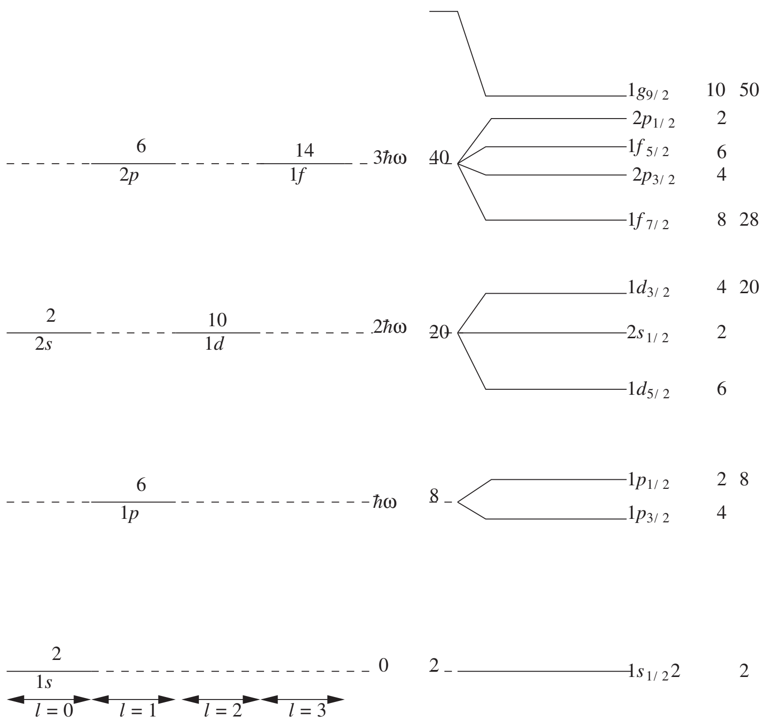



FIG. 16.4 – Les premiers niveaux du modèle en couches du noyau. L'effet du couplage spin-orbite est donné sur la partie de droite de la figure.

**1.** Porter sur la partie gauche de la figure 16.4 la dégénérescence de chacun des niveaux, sans oublier la dégénérescence de spin, ainsi que le nombre total de nucléons *d'un type donné*, proton ou neutron, que l'on peut mettre avec une énergie $0, \leq \hbar\omega, \leq 2\hbar\omega, \leq 3\hbar\omega$. Lorsque les protons ou les neutrons forment une couche complète, les noyaux possèdent des propriétés de stabilité remarquables, tout comme les gaz rares dans le cas des atomes. On dit alors que le noyau comprend un "nombre magique" de protons ou de neutrons. Lorsque les nombres de neutrons et de protons sont tous deux magiques, on

dit que le “noyau est doublement magique”. Montrer que les premiers nombres magiques sont 2, 8, 20 et 40.

**2.** En fait, l’ordre des niveaux de la figure 16.4 est perturbé par un important couplage spin-orbite $V_{\rm so}(\vec{L}_i \cdot \vec{S}_i)$ pour le nucléon $i$. Ce potentiel est tel que le niveau $j = l + 1/2$ est plus bas que le niveau $j = l - 1/2$, ce qui donne le schéma de droite sur la figure 16.4. Porter sur cette figure la dégénérescence de chaque niveau, et montrer que les nombres magiques sont en fait : 2, 8, 20, 28 et 50.

**3.** Comme dans le cas des atomes, le moment angulaire total d’une couche complète est nul. En déduire le spin (= moment angulaire total) du tritium $^3$H $(Z = 1, N = 2)$ et de l’hélium $^3$He $(Z = 2, N = 1)$ ainsi que leurs moments magnétiques, et comparer aux valeurs expérimentales

$$^3\text{H} \; : \; \mu = 2.98\, \mu_N \qquad\qquad ^3\text{He} \; : \; \mu = -2.13\, \mu_N$$

La définition du moment magnétique est donnée dans l’exercice précédent, équations (16.30) et (16.31).

**4.** On s’intéresse maintenant aux noyaux dits pair-impair : $Z$ pair et $N$ impair, ou l’inverse. On observe la règle *empirique* suivante : deux nucléons identiques se couplent pour donner un moment angulaire nul. En utilisant cette règle et la figure 16.4, déterminer le spin des noyaux suivants

$$\begin{array}{lll} ^7\text{Li}\,(Z=3, N=4) & ^9\text{Be}\,(Z=4, N=5) & ^{13}\text{C}\,(Z=6, N=7) \\ ^{17}\text{O}\,(Z=8, N=9) & ^{41}\text{K}\,(Z=19, N=22) & ^{43}\text{Ca}\,(Z=20, N=23) \end{array}$$

**5.** Pour calculer le moment magnétique d’un noyaux pair-impair, on admet que ce moment magnétique est dû uniquement au nucléon non apparié, et l’opérateur $\vec{\mu}$ (16.30) devient

$$\vec{\mu} = \gamma_l \vec{L} + \gamma_s \vec{S}$$

où $\gamma_l$ et $\gamma_s$ sont les facteurs gyromagnétiques orbital et de spin du nucléon non apparié, les valeurs de $\gamma_l$ et $\gamma_s$ ayant été données dans l’excercice 16.4.3. Montrer que

$$\begin{aligned} \mu &= \gamma_l \left( j - \frac{1}{2} \right) \hbar + \frac{1}{2} \gamma_s \hbar & \qquad j &= l + \frac{1}{2} \\ \mu &= \frac{j\hbar}{j+1} \left[ \gamma_l \left( j + \frac{3}{2} \right) - \frac{1}{2} \gamma_s \right] & \qquad j &= l - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

En déduire les moments magnétiques des noyaux de la question **4** et comparer aux valeurs expérimentales données en unités de $\mu_N$

$^7$Li : 3.26 ; $^9$Be : $-1.18$ ; $^{13}$C : 0.70 ; $^{17}$O : $-1.89$ ; $^{41}$K : 0.21 ; $^{43}$Ca : $-1.31$

## 16.5 Bibliographie

L'atome d'hélium et les atomes complexes sont décrits par Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], compléments $A_{XIV}$ et $B_{XIV}$. Pour un traitement détaillé des atomes et des molécules diatomiques, on pourra consulter Landau et Lifschitz [1966], chapitres X et XI, ou Bransden et Joachain (1983), chapitres 6, 7, 9 et 10.

# Chapitre 17

# Champ électromagnétique quantifié

Ce chapitre traite de la quantification du champ électromagnétique, qui permet de justifier le concept de photon, et de quelques applications importantes. La section 17.1 donne les bases de cette quantification, en commençant par un cas simple, celui d'un mode unique. La section 17.2 étudie les états du champ électromagnétique : état du vide, états cohérents, états de Fock (c'est-à-dire à nombre de photons fixé), états comprimés. Ces notions sont appliquées à la physique des lames séparatrices. Le § 17.2.3 introduit le hamiltonien approché de l'interaction d'un atome à deux niveaux avec un champ quantifié, dans la version de Jaynes-Cummings. La section 17.3 décrit l'interaction atome-champ, d'abord dans le cadre du champ classique, puis dans celui du champ quantifié. Enfin, la section 17.4 décrit quelques résultats de base simples sur la détection et les corrélations de photons, en terminant par l'effet Hanbury-Brown et Twiss.

## 17.1 Quantification du champ électromagnétique

Nous avons déjà rencontré à plusieurs reprises le concept de photon. Le photon est associé aux propriétés quantiques du champ électromagnétique, et pour donner un statut théorique à ce concept, il faut quantifier le champ électromagnétique. Ceci se fera très simplement si l'on reconnaît l'analogie entre un mode du champ et un oscillateur harmonique.

Avant de passer à la quantification du champ électromagnétique, rappelons les équations de Maxwell (1.8)–(1.9) pour le champ électrique $\vec{E}$ et le champ magnétique $\vec{B}$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \qquad \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{17.1}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho_{\rm em}}{\varepsilon_0} \qquad c^2 \vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon_0} \vec{\jmath}_{\rm em} \tag{17.2}$$

Les deux équations (17.1) sont des équations de *contraintes* sur les champs $\vec{E}$ et $\vec{B}$, tandis que les deux équations (17.2) dépendent des *sources* du champ électromagnétique, c'est-à-dire de la densité de charge $\rho_{\rm em}$ et de la densité de courant $\vec{\jmath}_{\rm em}$. On déduit des équations de Maxwell l'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho_{\rm em}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\jmath}_{\rm em} = 0 \tag{17.3}$$

### 17.1.1 Quantification d'un mode

Avant d'examiner le cas général, nous allons d'abord étudier le cas plus simple de la quantification d'un mode du champ électromagnétique, ce qui suffira en pratique pour la plupart des problèmes étudiés par la suite. Nous allons exploiter l'analogie entre ce mode traité classiquement et un oscillateur harmonique classique écrit pour une particule de masse $m = 1$, le hamiltonien étant

$$H_{\rm cl} = \frac{1}{2} \left[ p^2(t) + \omega^2 q^2(t) \right] \tag{17.4}$$

Les équations de Hamilton sont

$$\frac{\partial H_{\rm cl}}{\partial p} = p = \dot{q} \qquad \frac{\partial H_{\rm cl}}{\partial q} = \omega^2 q = -\dot{p} \tag{17.5}$$

Les variables $q$ et $p$ étant canoniquement conjuguées, la quantification suit les règles de la section 4.3 : $q \to Q$, $p \to P$ avec $[Q, P] = \mathrm{i}\hbar I$.

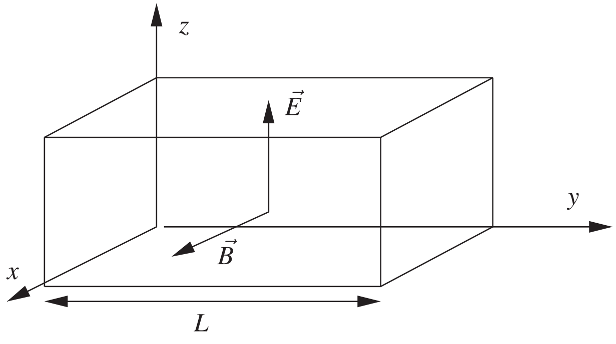



FIG. 17.1 – Cavité pour le champ électromagnétique.

Considérons une cavité métallique parallépipédique de volume $\mathcal{V}$, de longueur $L$ suivant la direction $Oy$ et un mode du champ classique dans cette cavité (figure 17.1)

$$\vec{E}_{\rm cl} = \hat{z}\, e(t) \sin ky \qquad \vec{B}_{\rm cl} = \hat{x}\, b(t) \cos ky \tag{17.6}$$

La dépendance spatiale est en $\sin ky$ ou $\cos ky$ parce que la cavité est un parallélépipède. En général, ce serait celle d'un mode propre de la cavité. La composante transversale de $\vec{E}_{\rm cl}$ doit s'annuler sur les parois de la cavité, ce qui impose $k = n\pi/L$, $n = 1, 2, \cdots$ Les fonctions $e(t)$ et $b(t)$ sont liées par les équations de Maxwell[1]

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}_{\rm cl} = -\frac{\partial \vec{B}_{\rm cl}}{\partial t} \Longrightarrow ke(t) = -\frac{{\rm d}b}{{\rm d}t} \tag{17.7}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B}_{\rm cl} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial \vec{E}_{\rm cl}}{\partial t} \Longrightarrow \frac{{\rm d}e}{{\rm d}t} = c^2 kb(t) \tag{17.8}$$

L'énergie $H_{\rm cl}$ contenue dans la cavité s'obtient à partir de la densité d'énergie du champ électromagnétique

$$\epsilon_{\rm cl} = \frac{1}{2}\,\varepsilon_0(\vec{E}^2_{\rm cl} + \vec{B}^2_{\rm cl}) \tag{17.9}$$

soit

$$\begin{aligned} H_{\rm cl} &= \frac{1}{2}\,\varepsilon_0 \int_{\mathcal{V}} {\rm d}^3 r\ \left[e^2(t)\sin^2 ky + c^2 b^2(t)\cos^2 ky\right] \\ &= \frac{1}{4}\,\varepsilon_0 \mathcal{V}\left[e^2(t) + c^2 b^2(t)\right] \end{aligned} \tag{17.10}$$

La comparaison entre (17.4) et (17.10) suggère la définition suivante, avec $\omega = ck$

$$q = \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{\varepsilon_0 \mathcal{V}}{2}}\ e \qquad p = c\sqrt{\frac{\varepsilon_0 \mathcal{V}}{2}}\ b \tag{17.11}$$

Les équations de Maxwell (17.7) et (17.8) deviennent alors identiques à (17.5)

$$\frac{{\rm d}q}{{\rm d}t} = p \qquad \frac{{\rm d}p}{{\rm d}t} = -\omega^2 q \tag{17.12}$$

tandis que (17.10) prend par construction la forme (17.4).

---

1. Combinant les équations (17.7) et (17.8), on obtient aussi, avec $\omega = ck$

$$\frac{{\rm d}^2 e}{{\rm d}t^2} + \omega^2 e = 0 \qquad \frac{{\rm d}^2 b}{{\rm d}t^2} + \omega^2 b = 0$$

La dépendance temporelle est donc

$$e(t) = e_0 \exp(\pm {\rm i}\omega t) \qquad b(t) = b_0 \exp(\pm {\rm i}\omega t)$$

.

Pour quantifier le champ électromagnétique, on utilise le fait que les variables $q$ et $p$ (17.11) sont canoniquement conjuguées, et on leur fait correspondre des opérateurs $Q$ et $P$ obéissant à $[Q,P]=\mathrm{i}\hbar I$. De façon équivalente, on écrit $Q$ et $P$ en fonction d'opérateurs $a$ et $a^\dagger$ obéissant à $[a,a^\dagger]=I$

$$Q=\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\;\left(a+a^\dagger\right) \qquad P=\frac{1}{\mathrm{i}}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\left(a-a^\dagger\right) \tag{17.13}$$

Les équations (17.6) et (17.11) donnent alors l'expression du champ électromagnétique quantifié $(\vec{\mathsf{E}},\vec{\mathsf{B}})$

$$\begin{aligned}\vec{\mathsf{E}} &= \hat{z}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}}\left(a+a^\dagger\right)\sin ky\\ \vec{\mathsf{B}} &= \hat{x}\,\frac{1}{\mathrm{i}c}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}}\left(a-a^\dagger\right)\cos ky\end{aligned} \tag{17.14}$$

Le hamiltonien quantique est évidemment identique à (10.9)

$$H=\hbar\omega\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right) \tag{17.15}$$

Dans le processus de quantification, les champs $\vec{E}_{\mathrm{cl}}$ et $\vec{B}_{\mathrm{cl}}$ sont devenus des *opérateurs* hermitiens $\vec{\mathsf{E}}$ et $\vec{\mathsf{B}}$, et l'équation (17.14) donne ces opérateurs dans le point de vue de Schrödinger. Pour obtenir une dépendance temporelle comme dans (17.6), il faut passer au point de vue de Heisenberg, et nous avons besoin des opérateurs $a$ et $a^\dagger$ dans ce point de vue. Contentons-nous d'examiner $a$, car $a^\dagger$ s'en déduit par conjugaison hermitienne. Par définition, l'opérateur $a_{\mathrm{H}}(t)$ du point de vue de Heisenberg est

$$a_{\mathrm{H}}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}\,a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar} \tag{17.16}$$

où $H$ est donné par (17.15). L'opérateur $a_{\mathrm{H}}(t)$ vérifie l'équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}a_{\mathrm{H}}(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}\,[H,a]\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}=-\mathrm{i}\omega a_{\mathrm{H}}(t) \tag{17.17}$$

où nous avons utilisé le commutateur $[a^\dagger a,a]=-a$. L'équation différentielle (17.17) s'intègre immédiatement, et avec la condition aux limites habituelle $a_{\mathrm{H}}(t=0)=a$

$$\boxed{a_{\mathrm{H}}(t)=a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \qquad a_{\mathrm{H}}^\dagger(t)=a^\dagger\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega t}} \tag{17.18}$$

Cela donne les champs $\vec{\mathsf{E}}$ et $\vec{\mathsf{B}}$ dans le point de vue de Heisenberg section 10.3

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{\mathsf{E}}_{\mathrm{H}}(t) &= \hat{z}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}}\left(a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+a^\dagger\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega t}\right)\sin ky\\ \vec{\mathsf{B}}_{\mathrm{H}}(t) &= \hat{x}\,\frac{1}{\mathrm{i}c}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}}\left(a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}-a^\dagger\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega t}\right)\cos ky\end{aligned}} \tag{17.19}$$

Le point crucial est l'interprétation physique des opérateurs $a$ et $a^\dagger$. Les niveaux d'énergie de (17.15) sont donnés par (10.14), et on peut les interpréter de la façon suivante : l'état $|n\rangle$ (10.18) d'énergie $(n+1/2)\hbar\omega$ est un état à $n$ photons dans le mode de la cavité défini par (17.6), chaque photon ayant une énergie $\hbar\omega$. L'état à zéro photon $|0\rangle$, ou *état du vide*, correspond à une énergie non nulle $\hbar\omega/2$ : la cavité, même vide, possède une énergie, appelée *énergie de point zéro*. Par une redéfinition du zéro d'énergie, on peut décider d'annuler cette énergie de point zéro. Cependant, on ne peut pas se débarrasser des fluctuations autour de cette énergie de point zéro, et ces fluctuations donnent lieu à des effets observables, ainsi que nous le verrons ultérieurement.

### 17.1.2 Cas général

Ainsi que nous l'avons déjà mentionné, les résultats de la sous-section précédente sont suffisants pour aborder l'essentiel des développements ultérieurs, et cette sous-section peut être omise en première lecture, à partir de (17.24). Avant de procéder à la quantification, revenons un instant sur le cas classique. Les champs[2] $\vec{E}$ et $\vec{B}$ sont liés par des contraintes, ce qui fait que les six composantes ne sont pas indépendantes. De plus, comme le montre l'effet Aharonov-Bohm (§ 12.3.3), l'interaction du champ électromagnétique avec les charges n'est pas locale. Il est souvent préférable de passer par l'intermédiaire des potentiels[3] scalaire $\overline{V}$ et vecteur $\vec{A}$ dont on déduit les champs

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\overline{V} - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \qquad \vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A} \tag{17.20}$$

Cette utilisation des potentiels au lieu des champs ne devrait pas surprendre : en effet, en mécanique quantique, nous n'avons jamais utilisé les forces, reliées directement aux champs $\vec{E}$ et $\vec{B}$ par la loi de Lorentz (1.11), mais toujours l'énergie potentielle. En mécanique quantique, ce sont l'énergie et l'impulsion qui jouent le rôle fondamental, car ce sont elles qui influencent directement la phase de la fonction d'onde. En présence d'un champ électrique $\vec{E}$, c'est le potentiel $\overline{V}$ qui intervient directement dans l'équation de Schrödinger *via* l'énergie potentielle $V = q\overline{V}$. En présence d'un champ magnétique $\vec{B}$, c'est le potentiel vecteur $\vec{A}$ qui intervient directement dans l'équation de Schrödinger, et non le champ $\vec{B}$ : voir la section 10.3.

Les potentiels ne sont pas uniques. En effet, dans une *transformation de jauge*, déjà introduite pour $\vec{A}$ au § 10.3.1

$$\boxed{\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla}\Lambda \qquad \overline{V} \to \overline{V}' = \overline{V} + \frac{\partial \Lambda}{\partial t}} \tag{17.21}$$

2. Afin d'alléger les notations, nous abandonnons l'indice cl jusqu'à (17.25), aucune confusion n'étant possible.

3. Nous utilisons la notation $\overline{V}$ pour le potentiel électrique (ou potentiel scalaire), afin de ne pas créer de confusion avec l'énergie potentielle $V$ : une particule de charge $q$ dans le potentiel $\overline{V}$ a une énergie potentielle $V = q\overline{V}$.

où $\Lambda(\vec{r}, t)$ est une fonction scalaire de l'espace et du temps, les champs $\vec{E}$ et $\vec{B}$ ne sont pas modifiés. Afin de lever l'arbitraire sur les potentiels $(\vec{A}, \overline{V})$, on fait souvent un *choix de jauge* en imposant une condition sur $(\vec{A}, \overline{V})$. Un choix fréquent que nous adopterons (mais ce n'est pas le seul possible !) est celui de la *jauge de Coulomb*, ou *jauge de rayonnement*

$$\boxed{\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0} \tag{17.22}$$

Avec ce choix, le potentiel vecteur est transverse : en effet, si l'on passe dans l'espace de Fourier, la condition (17.22) se traduit par $\vec{k} \cdot \vec{A}(\vec{k}) = 0$. D'après la première des équations (17.2) et (17.22)

$$\vec{\nabla} \cdot \left( \vec{\nabla}\overline{V} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = \nabla^2 \overline{V} + \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) = \nabla^2 \overline{V} = -\frac{\rho_{\text{em}}}{\varepsilon_0} \tag{17.23}$$

d'où l'on déduit le potentiel scalaire $\overline{V}$

$$\overline{V}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\rho_{\text{em}}(\vec{r}\,', t)}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} \, \mathrm{d}^3 r'$$

Cette expression du potentiel scalaire est appelée *potentiel de Coulomb instantané*, car les effets de retard ne sont pas apparents : le temps $t$ dans $\overline{V}$ est le même que celui de la source $\rho_{\text{em}}$. Cette caractéristique pourrait sembler incompatible avec la relativité, mais on doit se souvenir qu'un potentiel n'est pas directement observable, et la contradiction est seulement apparente[4]. La déduction de l'équation donnant $\vec{A}$ en fonction de $\vec{\jmath}_{\text{em}}$ est proposée dans l'exercice 17.5.1.

En l'absence de sources : $\rho_{\text{em}} = \vec{\jmath}_{\text{em}} = 0$, la seconde des équations (17.2) s'écrit

$$c^2 \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = c^2 \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - c^2 \nabla^2 \vec{A} = -\frac{\partial (\vec{\nabla}\overline{V})}{\partial t} - \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2}$$

et tenant compte de (17.22) et de $\overline{V} = 0$, nous obtenons l'équation d'ondes pour $\vec{A}$

$$\frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \vec{A} = 0 \tag{17.24}$$

Enfin, compte tenu de l'expression classique de la densité d'énergie du champ électromagnétique, l'expression du hamiltonien classique est

$$H_{\text{cl}} = \frac{1}{2}\, \varepsilon_0 \int \mathrm{d}^3 r \, \left( \vec{E}_{\text{cl}}^{\;2} + c^2 \vec{B}_{\text{cl}}^{\;2} \right) \tag{17.25}$$

4. *cf.* Weinberg [1995], chapitre 8.

Revenons maintenant à la quantification, en partant de de la décomposition de Fourier du potentiel vecteur classique

$$\vec{A}_{\rm cl}(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k}s} \left[ A_{\vec{k}s}(t)\vec{e}_s(\vec{k})\,{\rm e}^{{\rm i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + A^*_{\vec{k}s}(t)\,\vec{e}^{\,*}_s(\vec{k})\,{\rm e}^{-{\rm i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \right] \tag{17.26}$$

Nous choisirons dans cette sous-section des conditions aux limites périodiques dans une boîte parallépipédique de côtés $L_x, L_y, L_z$, ou quantification dans une boîte de volume $\mathcal{V} = L_x L_y L_z$

$$\vec{k} = \left( k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}, k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}, k_z = \frac{2\pi n_z}{L_z} \right) \qquad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots\cdots$$

Un des entiers $n_x, n_y, n_z$ doit être non nul. Nous avons introduit des vecteurs $\vec{e}_s(\vec{k})$ dans la décomposition (17.26) car le champ $\vec{A}$ est un champ de vecteurs ; les vecteurs $\vec{e}_s(\vec{k})$ sont choisis unitaires, $\vec{e}^{\,*}_s(\vec{k}) \cdot \vec{e}_s(\vec{k}) = 1$ et ils représentent physiquement la polarisation du champ. Ils sont contraints par la condition de jauge (17.22). En effet, le gradient et le rotationnel sont donnés dans l'espace de Fourier par

$$\vec{\nabla} \cdot \left[ \vec{e}_s(\vec{k})\,{\rm e}^{{\rm i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \right] = {\rm i}[\vec{k} \cdot \vec{e}_s(\vec{k})]\,{\rm e}^{{\rm i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{17.27}$$

$$\vec{\nabla} \times \left[ \vec{e}_s(\vec{k})\,{\rm e}^{{\rm i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \right] = {\rm i}[\vec{k} \times \vec{e}_s(\vec{k})]\,{\rm e}^{{\rm i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{17.28}$$

et on déduit de (17.27) la condition d'orthogonalité $\vec{k} \cdot \vec{e}_s(\vec{k}) = 0$ : *le vecteur* $\vec{e}_s(\vec{k})$ *est un vecteur transverse* (par rapport à $\vec{k}$). Le vecteur $\vec{e}_s$ étant situé dans un plan, l'indice $s$ prend seulement deux valeurs. Un choix possible est $\{\vec{e}_x(\vec{k}), \vec{e}_y(\vec{k})\}$, où $\vec{e}_x(\vec{k}), \vec{e}_y(\vec{k})$ et $\hat{k}$ forment un trièdre direct : $s = x, y$. Ceci correspond à la décomposition de $\vec{A}$ sur des états de polarisation linéaire. Un autre choix possible est celui des états de polarisation circulaire

$$\vec{e}_D = -\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\vec{e}_x + {\rm i}\vec{e}_y) \qquad\qquad \vec{e}_G = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\vec{e}_x - {\rm i}\vec{e}_y) \tag{17.29}$$

avec $s = D,\ G$. On note l'identité importante, avec $i,\ j = x,\ y,\ z$

$$\sum_{s=1}^{2} e_{si}(\vec{k}) e^*_{sj}(\vec{k}) = \mathcal{P}_{ij} = \delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j \tag{17.30}$$

En effet, $\mathcal{P}_{ij}$ n'est autre que le projecteur sur le plan perpendiculaire à $\vec{k}$, et on vérifie bien que

$$\sum_j \mathcal{P}_{ij}\,\hat{k}_j = 0 \qquad\qquad \sum_j \mathcal{P}_{ij} e_{sj}(\vec{k}) = e_{si}(\vec{k})$$

De l'équation d'onde (17.24), on déduit l'équation d'évolution des modes $A_{\vec{k}s}$

$$\frac{\partial^2 A_{\vec{k}s}}{\partial t^2} + c^2 k^2 A_{\vec{k}s} = \frac{\partial^2 A_{\vec{k}s}}{\partial t^2} + \omega_k^2 A_{\vec{k}s} = 0 \tag{17.31}$$

en définissant la fréquence $\omega_k$ par $\omega_k = c|\vec{k}|$. On peut choisir comme solution de (17.31) (exercice 17.5.2)

$$A_{\vec{k}s}(t) = A_{\vec{k}s}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_k t} \qquad A^*_{\vec{k}s}(t) = A^*_{\vec{k}s}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_k t} \tag{17.32}$$

où $A_{\vec{k}s} = A_{\vec{k}s}(t=0)$. Ceci donne la dépendance en $t$ de $\vec{A}_{\mathrm{cl}}(\vec{r},t)$

$$\vec{A}_{\mathrm{cl}}(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},s}\left[A_{\vec{k}s}\,\vec{e}_s(\vec{k})\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} + A^*_{\vec{k}s}\,\vec{e}^{\,*}_s(\vec{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)}\right] \tag{17.33}$$

On en déduit les champs $\vec{E}_{\mathrm{cl}}$ et $\vec{B}_{\mathrm{cl}}$ que nous nous contentons d'écrire au temps $t=0$

$$\begin{aligned}
\vec{E}_{\mathrm{cl}}(\vec{r},t=0) &= \mathrm{i}\sum_{\vec{k},s}\omega_k\left(A_{\vec{k}s}\,\vec{e}_s(\vec{k}) - A^*_{-\vec{k}s}\,\vec{e}^{\,*}_s(-\vec{k})\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{k},s}\vec{E}_{\vec{k}s}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\\
\vec{B}_{\mathrm{cl}}(\vec{r},t=0) &= \frac{\mathrm{i}}{c}\sum_{\vec{k},s}\omega_k\hat{k}\times\left(A_{\vec{k}s}\,\vec{e}_s(\vec{k}) - A^*_{-\vec{k}s}\,\vec{e}^{\,*}_s(-\vec{k})\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{k},s}\vec{B}_{\vec{k}s}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}
\end{aligned} \tag{17.34}$$

Ces expressions permettent de calculer aisément le hamiltonien du champ électromagnétique si l'on utilise la relation de Parseval[5] (exercice 19.6.12)

$$\sum_s\int \mathrm{d}^3r\,\vec{E}_s^2(\vec{r}) = \mathcal{V}\sum_{\vec{k},s,s'}\vec{E}_{\vec{k}s}\cdot\vec{E}_{-\vec{k}s'} \tag{17.35}$$

On en déduit

$$\begin{aligned}
\frac{\varepsilon_0}{2}\sum_s\int \mathrm{d}^3r\,\vec{E}_s^2(\vec{r}) &= \varepsilon_0\mathcal{V}\sum_{\vec{k},s}\omega_k^2 A^*_{\vec{k}s}A_{\vec{k}s} - R\\
R &= \frac{\varepsilon_0\mathcal{V}}{2}\sum_{\vec{k},s,s'}\omega_k^2\Big[A_{\vec{k}s}A_{-\vec{k}s'}\vec{e}_s(\vec{k})\cdot\vec{e}_{s'}(-\vec{k})\\
&\quad + A_{-\vec{k}s}A_{\vec{k}s'}\vec{e}^{\,*}_s(-\vec{k})\cdot\vec{e}^{\,*}_{s'}(\vec{k})\Big]
\end{aligned} \tag{17.36}$$

où $\mathcal{V} = L_xL_yL_z$ est le volume de quantification. Le calcul de la contribution du champ magnétique au hamiltonien s'effectue suivant le même principe, en utilisant l'identité vectorielle

$$(\vec{A}\times\vec{B})\cdot(\vec{C}\times\vec{D}) = (\vec{A}\cdot\vec{C})(\vec{B}\cdot\vec{D}) - (\vec{A}\cdot\vec{D})(\vec{B}\cdot\vec{C})$$

5. Étant donné que ce hamiltonien est indépendant du temps, on peut le calculer à $t=0$.

appliquée à

$$\left[\hat{k}\times\vec{e}_s(\vec{k})\right]\cdot\left[\hat{k}\times\vec{e}^{\,*}_{s'}(\vec{k})\right] = \vec{e}^{\,*}_{s'}(\vec{k})\cdot\vec{e}_s(\vec{k}) = \delta_{ss'}$$
$$\left[\hat{k}\times\vec{e}_s(\vec{k})\right]\cdot\left[\hat{k}\times\vec{e}_{s'}(-\vec{k})\right] = \vec{e}_s(\vec{k})\cdot\vec{e}_{s'}(-\vec{k})$$

On en déduit la contribution du champ magnétique

$$\frac{1}{2}\,\varepsilon_0 c^2\int \mathrm{d}^3r\,\vec{B}_{\rm cl}(\vec{r},t=0) = \varepsilon_0\mathcal{V}\sum_{\vec{k},s}\omega_k^2 A^*_{\vec{k}s}A_{\vec{k}s} + R \tag{17.37}$$

Combinant (17.36) et (17.37), on obtient la forme finale de $H_{\rm cl}$

$$H_{\rm cl} = 2\varepsilon_0\mathcal{V}\sum_{\vec{k},s}\omega_k^2 A^*_{\vec{k}s}A_{\vec{k}s} \tag{17.38}$$

Il reste à trouver les variables conjuguées $q_{\vec{k}s}$ et $p_{\vec{k}s}$ afin de procéder à la quantification comme dans la sous-section précédente. Ces variables sont

$$q_{\vec{k}s} = (\varepsilon_0\mathcal{V})^{1/2}\left(A_{\vec{k}s}+A^*_{\vec{k}s}\right)$$
$$p_{\vec{k}s} = \frac{\omega_k}{\mathrm{i}}\,(\varepsilon_0\mathcal{V})^{1/2}\left(A_{\vec{k}s}-A^*_{\vec{k}s}\right) \tag{17.39}$$

Compte tenu de

$$\dot{A}_{\vec{k}s}(t) = -\mathrm{i}\omega_k A_{\vec{k}s}(t) \qquad \dot{A}^*_{\vec{k}s}(t) = \mathrm{i}\omega_k A^*_{\vec{k}s}(t)$$

on vérifie immédiatement l'analogue de (17.12)

$$\dot{q}_{\vec{k}s} = p_{\vec{k}s} \qquad \dot{p}_{\vec{k}s} = -\omega_k^2 q_{\vec{k}s} \tag{17.40}$$

tandis que le facteur commun de normalisation dans (17.30) permet de trouver l'expression de $H_{\rm cl}$ qui généralise (17.4) et montre que $H_{\rm cl}$ (17.25) est une somme de hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques *indépendants*

$$H_{\rm cl} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},s}\left(p^2_{\vec{k}s}+\omega_k^2 q_{\vec{k}s}\right) \tag{17.41}$$

Pour quantifier la théorie, on s'inspire à nouveau de (17.13) en définissant des opérateurs $a_{\vec{k}s}$ et $a^\dagger_{\vec{k}s}$ qui vérifient les relations de commutation

$$\boxed{\left[a_{\vec{k}s}, a^\dagger_{\vec{k}'s'}\right] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\,\delta_{ss'}\,I} \tag{17.42}$$

Les opérateurs $Q_{\vec{k}s}$ et $P_{\vec{k}s}$ sont alors

$$Q_{\vec{k}s} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}}\,\left(a_{\vec{k}s}+a^\dagger_{\vec{k},s}\right)$$
$$P_{\vec{k}s} = \frac{1}{\mathrm{i}}\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}}\,\left(a_{\vec{k}s}-a^\dagger_{\vec{k}s}\right) \tag{17.43}$$

ce qui assure la relation de commutation canonique

$$\left[Q_{\vec{k}s}, P_{\vec{k}'s'}\right] = \mathrm{i}\hbar\delta_{\vec{k},\vec{k}'}\,\delta_{ss'}I \tag{17.44}$$

Le hamiltonien s'obtient à partir de (17.41) sous la forme

$$\boxed{H = \sum_{\vec{k},s} \hbar\omega_k \left(a^\dagger_{\vec{k}s} a_{\vec{k}s} + \frac{1}{2}\right)} \tag{17.45}$$

Tout comme (17.41), ce hamiltonien décrit une collection d'oscillateurs harmoniques *indépendants*. L'opérateur $a_{\vec{k}s}$ ($a^\dagger_{\vec{k}s}$) détruit (crée) un photon de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de polarisation $s$, c'est-à-dire un photon dans le mode $(\vec{k}, s)$ ; $N_{\vec{k}s} = a^\dagger_{\vec{k}s} a_{\vec{k}s}$ est l'opérateur nombre de photons dans ce mode.

On déduit de (17.45) l'énergie (infinie) de point zéro

$$E_0 = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},s} \hbar\omega_k \to \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k\,\hbar ck = \frac{\hbar c\mathcal{V}}{2\pi^2}\int_0^\infty k^3\mathrm{d}k \tag{17.46}$$

où nous avons utilisé (8.133). Dans le rayonnement du corps noir, la mécanique quantique s'était révélée capable de contrôler les *fluctuations thermiques*, qui conduisaient à une énergie infinie en mécanique statistique classique. Mais nous avons éliminé cet infini pour en introduire un autre, cette fois lié aux *fluctuations quantiques*. Ces fluctuations quantiques ont des effets observables, comme l'effet Casimir (exercice 17.5.6). L'énergie de point zéro est aussi appelée *énergie du vide*, dont les propriétés restent encore aujourd'hui largement débattues, et qui pourrait jouer un rôle important en cosmologie.

Pour obtenir l'expression des champs quantifiés, le plus simple est de remarquer que les amplitudes classiques $A_{\vec{k}s}$ et $A^*_{\vec{k}s}$ sont remplacées par des opérateurs ; la comparaison avec (17.39) et (17.43) montre que[6]

$$A_{\vec{k}s} \to \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\mathcal{V}\omega_k}}\,a_{\vec{k}s} \qquad A^*_{\vec{k}s} \to \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\mathcal{V}\omega_k}}\,a^\dagger_{\vec{k}s} \tag{17.47}$$

Ceci donne l'expression du potentiel vecteur dans le point de vue de Heisenberg

$$\boxed{\vec{\mathsf{A}}_{\mathrm{H}}(\vec{r},t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}}\,\sum_{\vec{k}}\sum_{s=1}^{2}\frac{1}{\sqrt{\omega_k}}\left[a_{\vec{k}s}\vec{e}_s(\vec{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} + a^\dagger_{\vec{k}s}\vec{e}^{\,*}_s(\vec{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)}\right]} \tag{17.48}$$

6. Ce remplacement est ambigu dans l'expression (17.38) du hamiltonien, car classiquement $AA^* = A^*A$, et on doit passer par (17.41) pour procéder correctement. En revanche, il n'y a pas de problème pour les champs qui sont linéaires en $A$ et $A^*$.

On déduit de (17.48) l'expression du champ électrique quantifié $\vec{\mathsf{E}}_{\mathrm{H}} = -\partial\vec{\mathsf{A}}_{\mathrm{H}}/\partial t$

$$\vec{\mathsf{E}}_{\mathrm{H}}(\vec{r},t) = \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}}\sum_{\vec{k}}\sum_{s=1}^{2}\sqrt{\omega_k}\,\left[a_{\vec{k}s}\vec{e}_s(\vec{k})\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} - a^\dagger_{\vec{k}s}\vec{e}^{\,*}_s(\vec{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)}\right] \tag{17.49}$$

On remarquera que le facteur de normalisation global diffère de $1/\sqrt{2}$ en comparaison de celui figurant en (17.14). Ceci vient de ce que les fonctions d'onde normalisées pour une dimension d'espace $(y)$ sont, soit $\sqrt{1/L}\,\exp(\mathrm{i}ky)$, soit $\sqrt{2/L}\,\sin ky$. Pour le champ magnétique, on utilise (17.28)

$$\vec{\mathsf{B}}_{\mathrm{H}}(\vec{r},t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}}\sum_{\vec{k}}\sum_{s=1}^{2}\frac{\mathrm{i}}{c}\sqrt{\omega_k}\;\hat{k} \times \left[a_{\vec{k}s}\,\vec{e}_s(\vec{k})\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} - a^\dagger_{\vec{k}s}\,\vec{e}^{\,*}_s(\vec{k})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)}\right] \tag{17.50}$$

où $\times$ désigne un produit vectoriel. Comme dans une onde plane classique, on vérifie la relation $\vec{\mathsf{B}} = (\hat{k}/c)\times\vec{\mathsf{E}}$. Il est facile, comme dans le cas du champ bosonique scalaire (§ 14.4.3), de calculer les commutateurs des diverses composantes du champ à $t=0$. On trouve les relations de commutation suivantes entre la composante $\mathsf{A}_i$ du champ et celle $-\varepsilon_0\mathsf{E}_j$ de son moment conjugué[7] (exercice 17.5.3)

$$[\mathsf{A}_i(\vec{r}), -\varepsilon_0\mathsf{E}_j(\vec{r}\,')] = \mathrm{i}\hbar\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\left(\delta_{ij} - \hat{k}_i\hat{k}_j\right)I \tag{17.51}$$

où nous avons utilisé (8.133). On en déduit que $\mathsf{E}_x$ commute avec $\mathsf{B}_x$, mais non avec $\mathsf{B}_y$ ou $\mathsf{B}_z$ : on ne peut pas mesurer simultanément au même point la composante $x$ du champ électrique et la composante $y$ du champ magnétique.

Il est possible d'écrire un couplage du champ quantifié avec une source classique $\vec{\jmath}_{\mathrm{em}}\,(\vec{r},t)$ de la forme

$$W(t) = -\int\mathrm{d}^3r\,\vec{\jmath}_{\mathrm{em}}\,(\vec{r},t)\cdot\vec{\mathsf{A}}(\vec{r}) \tag{17.52}$$

Ce couplage généralise celui de l'oscillateur harmonique forcé de l'exercice 10.4.4 : la force $f(t)$ est remplacée par la source $\vec{\jmath}_{\mathrm{em}}$ et l'opérateur position $Q$ par le champ quantifié $\vec{\mathsf{A}}$. On peut alors montrer que si l'on part d'un état à zéro photon et si la source agit pendant un temps fini, on obtient un état cohérent du champ électromagnétique, où le nombre de photons dans un mode $\vec{k}$ est donné par une loi de Poisson dont la valeur moyenne est déterminée par $|\vec{\jmath}_{\mathrm{em}}(\vec{k},\omega_k)|^2$, $\vec{\jmath}_{\mathrm{em}}(\vec{k},\omega_k)$ étant la transformée de Fourier quadridimensionnelle[8] de $\vec{\jmath}_{\mathrm{em}}(\vec{r},t)$.

7. L'application des principes de la mécanique analytique au champ électromagnétique montre que le moment conjugué de $A_i$ est $-\varepsilon_0 E_i$ ; voir par exemple Weinberg [1995].

8. Voir l'exercice 17.5.3. On trouvera un traitement détaillé par exemple dans Le Bellac [1988], chapitre 9 ou Itzykson et Zuber [1980], chapitre 4.

Le champ quantifié $\vec{\mathsf{A}}$ a été écrit dans la jauge de Coulomb. C'est la jauge la plus commode pour traiter les problèmes élémentaires, mais ce n'est pas la jauge qui convient pour traiter l'électrodynamique quantique de façon générale. En effet, la condition $\vec{\nabla}\cdot\vec{\mathsf{A}} = 0$ privilégie un référentiel d'inertie particulier et l'invariance de Lorentz de la théorie n'est pas manifeste. Naturellement, il ne s'agit pas d'un défaut rédhibitoire, car il est possible de vérifier tous calculs faits l'invariance de Lorentz des résultats physiques. Le véritable défaut de la jauge de Coulomb est qu'elle conduit à des calculs inextricables car le programme de renormalisation (élimination des infinis) exige que l'on maintienne de façon explicite l'invariance de Lorentz, si l'on veut garder des calculs maniables[9]. Une jauge où l'invariance de Lorentz est manifeste est la jauge de Lorentz[10]

$$\frac{\partial \overline{V}}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$$

Cependant, la jauge de Lorentz introduit des états non physiques, que l'on doit correctement interpréter et éliminer des résultats physiques. Ces états non physiques n'apparaissent pas dans la jauge de Coulomb, qui est un exemple de "jauge physique". Malheureusement, on ne peut pas à la fois utiliser une jauge physique et conserver l'invariance de Lorentz formelle.

## 17.2 États du champ électromagnétique

### 17.2.1 Fluctuations quantiques du champ électromagnétique

Le champ électromagnétique quantifié est un opérateur et on doit pouvoir observer ses fluctuations quantiques. Dans l'état à zéro photon, ou état du vide $|0\rangle$, la valeur moyenne des champs électrique (17.49) et magnétique (17.50) est nulle

$$\langle 0|\vec{\mathsf{E}}_{\mathrm{H}}(\vec{r},t)|0\rangle = \langle 0|\vec{\mathsf{B}}_{\mathrm{H}}(\vec{r},t)|0\rangle = 0$$

car $\langle 0|a_{\vec{k}s}|0\rangle = \langle 0|a^{\dagger}_{\vec{k}s}|0\rangle = 0$, mais la nullité des valeurs moyennes n'implique pas celle des fluctuations ! Ces fluctuations ont des conséquences physiques importantes, et nous allons les examiner successivement dans plusieurs types d'états du champ : le vide, les états à nombre de photons fixé, les états cohérents et les états comprimés. Afin de simplifier la discussion, nous nous limitons à un seul mode comme dans le § 17.1.1 de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de polarisation $s$ fixés, $a_{\vec{k}s} \to a$, $\omega_k \to \omega$, en nous plaçant de plus à $y = 0$. Cette restriction à un mode unique est souvent une bonne approximation, par exemple pour un laser monomode si l'on peut négliger les effets transverses

9. D'un point de vue technique, les contre-termes qui éliminent les infinis sont contraints par l'invariance de Lorentz, si le choix de jauge respecte cette invariance formelle.

10. Cette invariance de Lorentz formelle est manifeste en notation quadri-dimensionnelle (voir (19.13)) : $\partial_\mu A^\mu = 0$, $A^\mu = (\overline{V}, \vec{A})$.

dus à la diffraction ou pour un mode dans une cavité supraconductrice. Le champ électrique (17.19) s'écrit

$$\mathsf{E}(t) = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}}\left(a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + a^\dagger \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega t}\right) \tag{17.53}$$

Nous avons supprimé l'indice H et la notation vectorielle afin d'alléger l'écriture. Calculons d'abord les fluctuations de $\mathsf{E}$ dans l'état du vide en utilisant

$$\left(a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + a^\dagger \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega t}\right)^2 = a^2\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t} + (a^\dagger)^2\mathrm{e}^{\,2\mathrm{i}\omega t} + 2a^\dagger a + I$$

Seul le dernier terme donne un résultat non nul quand on prend la valeur moyenne sur le vide et

$$\langle 0|\mathsf{E}^2(t)|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}$$

d'où la dispersion

$$\Delta_0\mathsf{E} = \left[\langle 0|\mathsf{E}^2(t)|0\rangle - \langle 0|\mathsf{E}(t)|0\rangle^2\right]^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} \tag{17.54}$$

Les fluctuations quantiques du champ électromagnétique ont des conséquences physiques importantes : outre l'effet Casimir (exercice 17.5.6), elles sont aussi à l'origine du clivage entre les niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ de l'atome d'hydrogène, dégénérés à l'approximation de la théorie relativiste de Dirac (*cf.* § 19.3.5), et qui est appelé *déplacement Lamb*. Ce déplacement $\simeq 4.38 \times 10^{-6}$ eV est une fraction de l'ordre de $10^{-7}$ de la différence d'énergie entre les niveaux $1s$ et $2s$, et il vaut 1058 MHz en unités de fréquence[11]. Ces fluctuations sont aussi responsables du moment magnétique anormal de l'électron : alors que l'invariance galiléenne et la théorie de Dirac prédisent un facteur gyromagnétique de l'électron $\gamma_e = q_e/m_e$, ce facteur est en fait

$$\gamma_e = \frac{q_e}{m_e}\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + O(\alpha^2)\right)$$

où $\alpha \simeq 1/137$ est la constante de structure fine.

Dans un état à nombre de photons $n$ fixé (dans le mode considéré), aussi appelé *état de Fock*, la valeur moyenne de $\mathsf{E}(t)$ est nulle car $\langle n|a|n\rangle = \langle n|a^\dagger|n\rangle = 0$, tandis que celle de $\mathsf{E}^2(t)$ vaut d'après (10.12)

$$\langle n|\mathsf{E}^2(t)|n\rangle = \frac{\hbar\omega(2n+1)}{\varepsilon_0\mathcal{V}}$$

11. Une faible partie de ce déplacement ($-27\,$MHz $\simeq 3$ %) est due, non aux fluctuations du champ électromagnétique, mais à celles du champ électron-positron. La création de paires (virtuelles) électron-positron a un effet d'écran sur le champ coulombien et agit comme une constante diélectrique du vide. L'effet est beaucoup plus important pour les atomes muoniques : *cf.* l'exercice 15.4.3 et la note 37 du chapitre 1.

d'où la dispersion $\Delta_n \mathsf{E}$ dans l'état $|n\rangle$

$$\Delta_n \mathsf{E} = \left[\langle n|\mathsf{E}^2|n\rangle - \langle n|\mathsf{E}|n\rangle^2\right]^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar\omega(2n+1)}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}} \tag{17.55}$$

Cette dispersion croît comme la racine carrée du nombre de photons lorsque $n \gg 1$. La phase est indéterminée dans un état de Fock, puisque $\Delta N = 0$. Même si le nombre de photons est très grand, un état de Fock est complètement non classique.

Des états plus fréquents en pratique que ceux à nombre de photons fixé sont les états cohérents $|z\rangle$. En effet, la grande majorité des sources lumineuses usuelles émettent des états du champ électromagnétique très proches d'un état cohérent (laser), ou d'un mélange statistique d'états cohérents (source classique). Calculons la valeur moyenne de $\mathsf{E}(t)$ dans un état cohérent en posant $z = |z| \exp(\mathrm{i}\theta)$

$$\langle z|\mathsf{E}(t)|z\rangle = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}} \left(z\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + z^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right) = 2\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}}\ |z| \cos(\omega t - \theta) \tag{17.56}$$

tandis que

$$\langle z|\mathsf{E}^2(t)|z\rangle = \frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}\ \left[\left(z\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + z^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right)^2 + 1\right]$$

La dispersion $\Delta_z \mathsf{E}$ dans un état cohérent est identique à la dispersion dans le vide

$$\Delta_z \mathsf{E} = \left[\langle z|\mathsf{E}^2(t)|z\rangle - \langle z|\mathsf{E}(t)|z\rangle^2\right]^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}} = \Delta_0 \mathsf{E} \tag{17.57}$$

Rappelons que le nombre moyen de photons est $\langle N\rangle_z = \langle z|N|z\rangle = |z|^2$ et la dispersion $\Delta_z N = |z|$ : lorsque le nombre moyen $\langle N\rangle_z$ de photons augmente, la valeur moyenne du champ électrique croît comme $\sqrt{\langle N\rangle_z}$, mais la dispersion reste constante. La distribution des valeurs de $\mathsf{E}$ est de plus en plus piquée relativement à la valeur moyenne, et cette valeur moyenne évolue comme un champ classique.

Définissons les opérateurs hermitiens $X_1$ et $X_2$, ou *opérateurs de quadrature* par

$$X_1 = \frac{1}{2}\ \left(a + a^\dagger\right) \qquad\qquad X_2 = \frac{1}{2\mathrm{i}}\ \left(a - a^\dagger\right) \tag{17.58}$$

qui vérifient la relation de commutation $[X_1, X_2] = \mathrm{i}/2$, d'où l'on tire l'inégalité de Heisenberg

$$\Delta X_1\ \Delta X_2 \geq \frac{1}{4} \tag{17.59}$$

Un calcul immédiat montre que

$$\mathsf{E}(t) = 2\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}}\ \left[X_1 \cos\omega t + X_2 \sin\omega t\right] \tag{17.60}$$

tandis que, suivant (10.39) et (17.58)

$$\langle X_1\rangle_z = \mathrm{Re}\, z \qquad \langle X_2\rangle_z = \mathrm{Im}\, z \qquad \Delta_z X_1 = \Delta_z X_2 = \frac{1}{2} \tag{17.61}$$

*L'inégalité de Heisenberg (17.59) est donc saturée quand le champ se trouve dans un état cohérent*, en conformité avec les résultats du § 10.2. La valeur moyenne $\langle \mathsf{E}(t)\rangle_z$ du champ est donnée par (17.56). Nous pouvons maintenant interpréter physiquement les résultats du § 10.2.2 pour le champ électromagnétique dans un état cohérent. Ainsi que nous l'avons vu en (10.46), le champ fluctue en amplitude et en phase autour de sa valeur moyenne (17.56). La fluctuation en amplitude est en valeur relative $\Delta_z E/\langle E\rangle \simeq 1/2|z| = 1/2\langle N\rangle^{1/2}$, où $\langle N\rangle$ est le nombre moyen de photons et $\Delta_z N = \langle N\rangle^{1/2}$, tandis que la fluctuation de phase vérifie (10.46) : $\Delta_z\phi\Delta_z\, N \simeq 1/2$ (figure 17.2a).

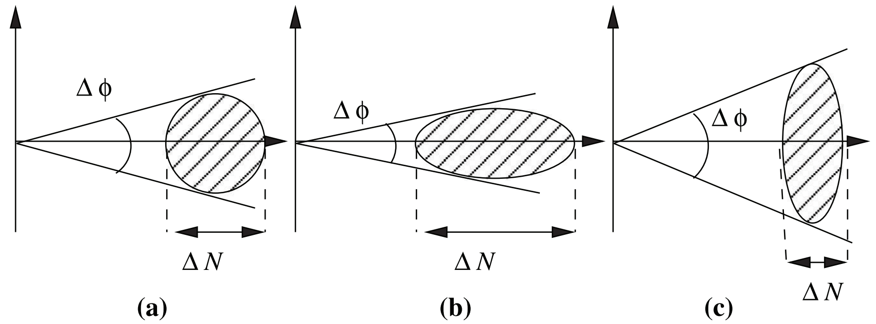



FIG. 17.2 – Représentation de Fresnel du champ électrique. La zone hachurée représente la dispersion sur l'extrémité du champ. (a) État cohérent. (b) et (c) États comprimés.

Il existe un autre type d'états intéressants, les *états comprimés*. Définissons l'opérateur unitaire

$$S(\tilde z) = \exp\left[\frac{1}{2}\left(\tilde z^* a^2 - \tilde z {a^\dagger}^2\right)\right] = \mathrm{e}^X \tag{17.62}$$

où $\tilde z$ est un nombre complexe, $\tilde z = r\exp(\mathrm{i}\theta)$, et calculons $S^\dagger(\tilde z)aS(\tilde z)$ en utilisant (2.70) et $X = -X^\dagger$

$$S^\dagger(\tilde z)aS(\tilde z) = a - [X,a] + \frac{1}{2!}[X,[X,a]] + \cdots$$

Un calcul immédiat montre que

$$S^\dagger(\tilde z)aS(\tilde z) = a\cosh r - a^\dagger \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\,\sinh r$$

On définit l'état comprimé $|\tilde z\rangle$ par

$$|\tilde z\rangle = S(\tilde z)|0\rangle \tag{17.63}$$

Les valeurs moyennes de $a$ et $a^\dagger$ dans cet état sont nulles : $\langle\tilde{z}|a|\tilde{z}\rangle = \langle\tilde{z}|a^\dagger|\tilde{z}\rangle = 0$, tandis que

$$\langle\tilde{z}|a^2|\tilde{z}\rangle = \langle\tilde{z}|(a^\dagger)^2|\tilde{z}\rangle^* = -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\sinh r\cosh r \qquad \langle\tilde{z}|a^\dagger a|\tilde{z}\rangle = \sinh^2 r$$

On en déduit les valeurs moyennes et les dispersions des opérateurs $X_1$ et $X_2$

$$\Delta_{\tilde{z}}X_1 = \frac{1}{2}(\cosh 2r - \cos\theta\sinh 2r)^{1/2} \qquad \Delta_{\tilde{z}}X_2 = \frac{1}{2}(\cosh 2r + \cos\theta\sinh 2r)^{1/2}$$

Ces expressions se simplifient lorsque $\theta = 0$

$$\theta = 0\ :\quad \Delta_{\tilde{z}}X_1 = \frac{1}{2}\,\mathrm{e}^{-r} \qquad \Delta_{\tilde{z}}X_2 = \frac{1}{2}\,\mathrm{e}^{r} \tag{17.64}$$

On constate que, par rapport à (17.61), la dispersion de $X_1$ est réduite et celle de $X_2$ augmentée, mais le produit $\Delta_{\tilde{z}}X_1\,\Delta_{\tilde{z}}X_2$ reste constant et égal à $1/4$ : les états comprimés, tout comme les état cohérents, saturent l'inégalité de Heisenberg. Les figures 17.2b et 17.2c montrent schématiquement la représentation de Fresnel du champ électrique dans un état comprimé. On voit que l'on peut, soit diminuer la dispersion sur la phase et augmenter celle sur $N$, soit inversement diminuer la dispersion sur le nombre de photons et augmenter celle sur $\phi$.

### 17.2.2 Lames séparatrices et détection homodyne

Les opérateurs $X_1$ et $X_2$ définis en (17.58) et leur généralisation $X_\theta, X_{[\theta+\pi/2]}$ définis ultérieurement dans cette sous-section peuvent être mesurés grâce à la *détection homodyne*, qui consiste à mélanger le champ à mesurer avec un signal de référence de même fréquence que celle du champ. Avant de décrire la détection homodyne, il est utile de transposer la discussion du § 1.4.5 sur l'action d'une lame séparatrice dans un formalisme opératoriel. Nous allons écrire l'analogue des relations (1.31) pour les opérateurs d'annihilation du champ dans les modes d'entrée et de sortie d'une lame séparatrice, et, comme dans le § 1.4.5, nous appelons ($a$) et ($b$) les modes d'entrée, ($c$) et ($d$) les modes de sortie ; ($a$) et ($b$) étiquettent deux modes du champ représentant des paquets d'ondes qui se mélangent dans la lame séparatrice. Nous choisissons une lame séparatrice déséquilibrée en posant

$$t = \cos\lambda \qquad r = \mathrm{i}\sin\lambda$$

L'équation (1.31) devient

$$\overline{c} = \overline{a}\cos\lambda + \mathrm{i}\overline{b}\sin\lambda$$
$$\overline{d} = \mathrm{i}\overline{a}\sin\lambda + \overline{b}\cos\lambda$$

Nous supposons que l'extension temporelle $\Delta\tau$ des paquets d'ondes est suffisamment grande de telle sorte que la fréquence $\omega$ est bien définie. Cependant,

$\Delta\tau$ doit être fini, afin que l'on puisse distinguer un "avant" ($t < -T$) et un "après" ($t > T$) du mélange par la lame séparatrice qui a lieu pour $t \sim 0$.

Nous recherchons un hamiltonien susceptible de décrire le mélange en terme d'opérateurs de champ $a$ et $b$, où $a$ et $b$ désignent les opérateurs d'annihilation des modes $(a)$ et $(b)$. Un opérateur conduisant au résultat recherché est

$$H = -\hbar g(t)\left(ab^\dagger + a^\dagger b\right)$$

Dans cette équation, $g(t)$ est une fonction lentement variable du temps, non nulle dans un intervalle de temps $[-T, +T]$, avec $T \gtrsim \Delta\tau$, et choisie telle que son intégrale temporelle soit précisément le paramètre $\lambda$ qui définit l'action du diviseur de faisceau

$$\int_{-T}^{+T} g(t)\,\mathrm{d}t = \lambda$$

Dans le point de vue de Heisenberg, qui est celui qui se raccorde le plus directement à la description classique, les opérateurs évoluent en fonction du temps, et entre $-T$ et $+T$, $a \to c$ et $b \to d$. Cette évolution est donnée par un opérateur unitaire $U(\lambda)$

$$c = U^\dagger(\lambda)\,a\,U(\lambda) \qquad\qquad d = U^\dagger(\lambda)\,b\,U(\lambda)$$

avec

$$U(\lambda) = \exp\left[\mathrm{i}\lambda\left(ab^\dagger + a^\dagger b\right)\right] = \exp[\mathrm{i}\lambda G] \qquad\qquad G = ab^\dagger + a^\dagger b \tag{17.65}$$

L'équation (2.70) permet de calculer les opérateurs d'annihilation des modes de sortie $c$ et $d$

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}G\lambda}\,a\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}G\lambda} &= a - \mathrm{i}\lambda[G,a] - \frac{\lambda^2}{2!}\,[G,[G,a]] + \cdots = a + \mathrm{i}\lambda b - \frac{1}{2!}\,\lambda^2 a + \cdots \\ &= a\cos\lambda + \mathrm{i}b\sin\lambda\end{aligned}$$

En résumé, la loi de transformation de $a$ et $b$ est identique à celle des amplitudes ondulatoires

$$\begin{aligned}c &= U^\dagger(\lambda)\,a\,U(\lambda) = a\cos\lambda + \mathrm{i}b\sin\lambda \\ d &= U^\dagger(\lambda)\,b\,U(\lambda) = \mathrm{i}a\sin\lambda + b\cos\lambda\end{aligned} \tag{17.66}$$

La forme $\exp(\mathrm{i}G\lambda)$ de $U$ montre que $U(\lambda)$ appliqué sur le vide des deux modes $|0_a 0_b\rangle$ redonne $|0_a 0_b\rangle$, car $G|0_a 0_b\rangle = 0$

$$U(\lambda)|0_a 0_b\rangle = |0_a 0_b\rangle$$

et cette forme montre aussi que $U^\dagger(\lambda) = U(-\lambda)$, d'où l'on déduit

$$\begin{aligned}U(\lambda)\,a^\dagger\,U^\dagger(\lambda) &= a^\dagger\cos\lambda + \mathrm{i}b^\dagger\sin\lambda \\ U(\lambda)\,b^\dagger\,U^\dagger(\lambda) &= \mathrm{i}a^\dagger\sin\lambda + b^\dagger\cos\lambda\end{aligned} \tag{17.67}$$

Revenons maintenant au point de vue de Schrödinger, où l'état final $|\Psi'\rangle$ est donné en terme de l'état initial $|\Psi\rangle$ par $|\Psi'\rangle = U(\lambda)|\Psi\rangle$, et examinons d'abord le cas d'un photon unique incident dans le mode $(a)$. Nous avons donc

$$|\Psi\rangle = |1_a 0_b\rangle = a^\dagger|0_a 0_b\rangle$$

Il est immédiat d'obtenir $|\Psi'\rangle$

$$\begin{aligned}|\Psi'\rangle &= U(\lambda)a^\dagger|0_a0_b\rangle = U(\lambda)a^\dagger U^\dagger(\lambda)U(\lambda)|0_a0_b\rangle \\ &= \left(a^\dagger\cos\lambda + \mathrm{i}b^\dagger\sin\lambda\right)|0_a0_b\rangle = \cos\lambda|1_a0_b\rangle + \mathrm{i}\sin\lambda|0_a1_b\rangle \quad (17.68)\end{aligned}$$

L'amplitude de probabilité pour que le photon sorte dans le mode $(a)$ est $\cos\lambda$, et l'amplitude de probabilité pour que le photon sorte dans le mode $(b)$ est $\mathrm{i}\sin\lambda$, ce qui est conforme à (1.31). Pour retrouver le cas classique, examinons l'action de la lame séparatrice sur un état cohérent $|z\rangle$ du mode $(a)$, tandis que le mode $(b)$ est vide. L'état initial est donné par

$$|\Psi\rangle = D_a(z)|0_a0_b\rangle = |z\rangle_a \otimes |0\rangle_b$$

où $D_a(z)$ est l'opérateur de déplacement (10.40) pour le mode $(a)$. $|\Psi'\rangle$ est donné par

$$\begin{aligned}|\Psi'\rangle &= U(\lambda)D_a(z)|0_a0_b\rangle = U(\lambda)D_a(z)U^\dagger(\lambda)U(\lambda)|0_a0_b\rangle \\ &= \exp\left(a^\dagger z\cos\lambda - az^*\cos\lambda\right)\exp\left(\mathrm{i}b^\dagger z\sin\lambda + \mathrm{i}bz^*\sin\lambda\right)|0_a0_b\rangle \\ &= D_a(z\cos\lambda)\,D_b(\mathrm{i}z\sin\lambda)|0_a0_b\rangle = |z\cos\lambda\otimes \mathrm{i}z\sin\lambda\rangle \qquad (17.69)\end{aligned}$$

où nous avons explicité le produit tensoriel : le résultat est un produit tensoriel de deux états cohérents. On retrouve manifestement l'action de la lame séparatrice sur une onde classique, avec une répartition de l'intensité ($|t|^2 = \cos^2\lambda, |r|^2 = \sin^2\lambda$) dans les deux voies de sortie.

Supposons maintenant que nous partions d'un état $|1_a1_b\rangle$, où un photon arrive dans le mode $a$ et l'autre dans le mode $b$, de part et d'autre de la lame séparatrice (figure 17.3)

$$|1_a1_b\rangle = a^\dagger b^\dagger|0_a0_b\rangle$$

La lame séparatrice transforme cet état en

$$\begin{aligned}|\Psi\rangle &= U(\lambda)a^\dagger b^\dagger|0_a0_b\rangle = U(\lambda)a^\dagger b^\dagger U^\dagger(\lambda)|0_a0_b\rangle \\ &= \left(a^\dagger\cos\lambda + \mathrm{i}b^\dagger\sin\lambda\right)\left(\mathrm{i}a^\dagger\sin\lambda + b^\dagger\cos\lambda\right)|0_a0_b\rangle \\ &= \frac{\mathrm{i}\sin 2\lambda}{\sqrt{2}}(|2_a0_b\rangle + |0_a2_b\rangle) + \cos 2\lambda|1_a1_b\rangle \qquad (17.70)\end{aligned}$$

où nous avons utilisé $(a^\dagger)^2|0\rangle = \sqrt{2}\,|2\rangle$ (*cf.* (10.18)). Si la lame séparatrice est équilibrée, avec $\lambda = \pi/4$

$$|\Psi\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(|2_a0_b\rangle + |0_a2_b\rangle) \qquad (17.71)$$

Les deux photons quittent simultanément la lame séparatrice, soit par une des deux voies de sortie, soit par l'autre (figure 17.3). La probabilité jointe de détecter un photon dans chaque voie est nulle. Ce résultat peut s'interpréter en terme de statistique de Bose-Einstein pour les photons (chapitre 14) : des photons identiques ont tendance à se regrouper et donc à emprunter la même voie de sortie. L'expérience a été réalisée par Santori *et al.* [2002] ; voir également Grangier [2002].

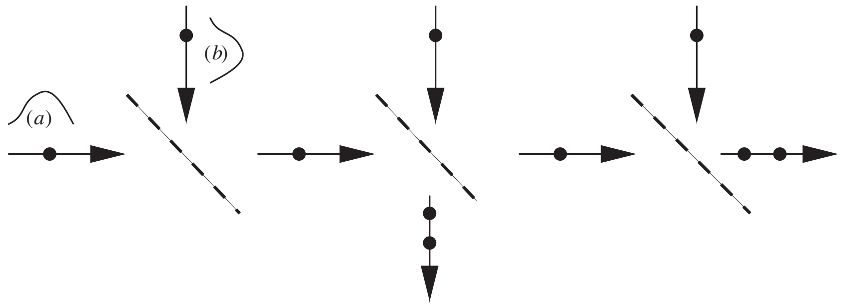



FIG. 17.3 – Lame séparatrice et interférences à deux photons.

Nous avons défini en (17.61) les opérateurs $X_1$ et $X_2$. De façon générale, les opérateurs de quadrature $X_\theta$ et $X_{[\theta+\pi/2]}$ sont définis par

$$\begin{aligned} X_\theta &= \frac{1}{2}\left(a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta} + a^\dagger\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\theta}\right) \\ X_{[\theta+\pi/2]} &= \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta} - a^\dagger\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\theta}\right) \end{aligned} \tag{17.72}$$

On a donc $X_1 = X_{\theta=0}$ et $X_2 = X_{\theta=\pi/2}$. Le champ électrique à $t = 0$ étant proportionnel à $X_1$, $X_\theta$ représente un champ obtenu par une rotation de la phase d'un angle $\theta$. Le point important est que l'on peut mesurer son amplitude par détection homodyne. Le signal $(a)$ est mélangé avec un oscillateur local $(b)$ à l'aide d'une lame séparatrice équilibrée ($|r| = |t| = 1/\sqrt{2}$, figure 17.3). Dans ces conditions,

$$c^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^\dagger + \mathrm{i}b^\dagger\right) \qquad\qquad d^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{i}a^\dagger + b^\dagger\right) \tag{17.73}$$

Les opérateurs nombre de photons dans les modes $c$ et $d$ sont respectivement

$$\begin{aligned} N_c &= c^\dagger c = \frac{1}{2}\left[a^\dagger a + b^\dagger b + \mathrm{i}\left(b^\dagger a - ab^\dagger\right)\right] \\ N_d &= d^\dagger d = \frac{1}{2}\left[a^\dagger a + b^\dagger b - \mathrm{i}\left(b^\dagger a - ab^\dagger\right)\right] \end{aligned} \tag{17.74}$$

Les deux premiers termes du crochet représentent respectivement les opérateurs nombre de photons du signal et de l'oscillateur local, tandis que les deux

derniers sont des termes d'interférence. La combinaison $(N_c - N_d)$ compte la différence entre le nombre de photons reçus par le détecteur $D_c$ et celui reçu par $D_d$

$$R(= R^\dagger) = N_c - N_d = \mathrm{i}\left(b^\dagger a - ab^\dagger\right)$$

Comme le signal et l'oscillateur local ne sont pas corrélés, nous avons $\langle a^\dagger b\rangle = \langle a^\dagger\rangle\langle b\rangle$. Si l'oscillateur local est un état cohérent $|z\rangle$, alors

$$\langle b\rangle = |z|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta} \qquad \langle b^\dagger\rangle = |z|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}$$

On suppose que l'oscillateur local est le champ d'un laser avec $|z| \gg 1$ ; les fluctuations de l'oscillateur local sont alors négligeables, car cet oscillateur se comporte approximativement comme un champ classique. Dans ces conditions, $R$ devient

$$R \simeq -\mathrm{i}|z|\left(a^\dagger\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta} - a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}\right) = 2|z|X_{[\theta+\pi/2]} \tag{17.75}$$

Le détecteur homodyne mesure donc la quadrature $X_{[\theta+\pi/2]}$. L'expérience est faite en envoyant une série de signaux identiques pour une valeur fixée de $\theta$, ce qui permet de déterminer la distribution de probabilité $\mathsf{p}(X_\theta)$, puis en faisant varier la phase $\theta$ de l'oscillateur local. On remonte ensuite à la distribution de Wigner (section 12.5) du champ électromagnétique quantifié. Une autre méthode (exercice 17.5.4) consiste à utiliser une lame séparatrice très déséquilibrée : $|t| \gg |r|$.

### 17.2.3 Hamiltonien de Jaynes-Cummings

Le hamiltonien de Jaynes-Cummings décrit de façon approchée l'interaction d'un atome à deux niveaux avec le champ électromagnétique quantifié. Son principal mérite est que l'opérateur d'évolution correspondant peut se calculer explicitement, car il se ramène à celui d'un système à deux niveaux. Nous décrirons à la fin de cette section une application aux oscillations de Rabi du vide, qui permettent de mettre directement en évidence la quantification du champ dans une cavité résonante.

Nous considérons un atome possédant un niveau fondamental (ou un niveau métastable de vie moyenne très longue) $|g\rangle$, et un niveau excité $|e\rangle$. On peut associer à la base $\{|g\rangle, |e\rangle\}$ deux vecteurs colonne d'un espace à deux dimensions

$$|g\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \qquad |e\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{17.76}$$

Soit $\hbar\omega_0 = E_e - E_g$ la différence d'énergie entre le niveau excité et le niveau fondamental. Nous allons étudier l'interaction de l'atome avec un mode (17.19) du champ électrique quantifié dans une cavité

$$\vec{\mathsf{E}}_{\mathrm{H}}(y,t) = \hat{z}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}}\left(a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + a^\dagger\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right)\sin ky \tag{17.77}$$

pour une fréquence $\omega \simeq \omega_0$ : nous nous plaçons donc au voisinage de la résonance, en définissant comme au chapitre 5 le désaccord par $\delta = \omega - \omega_0$. Soit $|\varphi_n^g\rangle$ (resp. $|\varphi_n^e\rangle$) l'état où l'atome est dans son niveau fondamental (resp. excité) et où la cavité contient exactement $n+1$ ($n$) photons

$$|\varphi_n^g\rangle = |g \otimes (n+1)\rangle \qquad |\varphi_n^e\rangle = |e \otimes n\rangle \tag{17.78}$$

Les états $|\varphi_n^g\rangle$ et $\varphi_n^e\rangle$ ont pour énergies respectives, en prenant comme zéro d'énergie la valeur moyenne de $E_g$ et $E_e$

$$\begin{aligned} E_n^g &= -\frac{1}{2}\hbar\omega_0 + (n+1)\hbar\omega \\ E_n^e &= \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + n\hbar\omega = -\frac{1}{2}\hbar\omega_0 + (n+1)\hbar\omega - \hbar\delta = E_n^g - \hbar\delta \end{aligned} \tag{17.79}$$

Ces états sont donc quasi-dégénérés car $\delta \ll \omega_0$. Cette propriété va nous permettre de nous restreindre à l'espace de Hilbert de dimension 2 sous-tendu par les vecteurs $|\varphi_n^g\rangle$ et $|\varphi_n^e\rangle$.

Le couplage de l'atome au champ se fait par le moment dipolaire électrique de transition $\vec{D}$, le hamiltonien d'interaction étant

$$\begin{aligned} W &= -\vec{D} \cdot \vec{\mathsf{E}}_{\mathrm{H}}(t=0) = -(\vec{D} \cdot \hat{z}) \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}} \left(a + a^\dagger\right) \sin ky \\ &= -(\vec{D} \cdot \hat{z}) g(y) \left(a + a^\dagger\right) \end{aligned} \tag{17.80}$$

où nous avons défini $g(y)$ par

$$g(y) = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}} \sin ky \tag{17.81}$$

Si les niveaux $|g\rangle$ et $|e\rangle$ ont une parité bien définie, l'atome dans l'état $|g\rangle$ ou $|e\rangle$ ne peut pas posséder de moment dipolaire

$$\langle g|\vec{D}|g\rangle = \langle e|\vec{D}|e\rangle = 0$$

et seuls les éléments de matrice non diagonaux peuvent être non nuls

$$\langle g|\vec{D} \cdot \hat{z}|e\rangle = \langle e|\vec{D} \cdot \hat{z}|g\rangle^* = d$$

Sans perte de généralité, nous pouvons supposer $d$ réel, ce qui permet d'écrire

$$\vec{D} \cdot \hat{z} = d(|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|) \tag{17.82}$$

Il sera commode d'introduire les matrices de Pauli $\sigma_+$ et $\sigma_-$

$$\sigma_+ = |g\rangle\langle e| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_- = \sigma_+^\dagger = |e\rangle\langle g| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{17.83}$$

ainsi que $\sigma_3$

$$\sigma_3 = |g\rangle\langle g| - |e\rangle\langle e| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{17.84}$$

ce qui permet de récrire le hamiltonien d'interaction sous la forme

$$W = \frac{1}{2}\,\hbar\lambda(y)(\sigma_+ + \sigma_-)\left(a + a^\dagger\right) \qquad \lambda(y) = \frac{2dg(y)}{\hbar} \tag{17.85}$$

Le hamiltonien total est

$$H = H_0 + W = H_{\rm at} + H_{\rm em} + W = -\frac{1}{2}\,\hbar\omega_0\sigma_3 + \hbar\omega a^\dagger a + \frac{1}{2}\,\hbar\lambda(y)(\sigma_+ + \sigma_-)\left(a + a^\dagger\right) \tag{17.86}$$

où $H_{\rm at}$ est le hamiltonien de l'atome, $H_{\rm em}$ celui du champ et $W$ l'interaction atome-champ. Comme au chapitre 5, nous allons nous placer dans le point de vue de l'interaction en définissant pour un opérateur $A$

$$\tilde{A}(t) = {\rm e}^{{\rm i}H_0 t/\hbar}\, A\, {\rm e}^{-{\rm i}H_0 t/\hbar} = {\rm e}^{{\rm i}(H_{\rm at}+H_{\rm em})t/\hbar}\, A\, {\rm e}^{-{\rm i}(H_{\rm at}+H_{\rm em})t/\hbar} \tag{17.87}$$

Nous avons montré en (5.57) que l'évolution de $\tilde{\sigma}_\pm(t)$ est donnée par

$$\tilde{\sigma}_\pm(t) = {\rm e}^{{\rm i}H_{\rm at}t/\hbar}\,\sigma_\pm\,{\rm e}^{-{\rm i}H_{\rm at}t/\hbar} = \sigma_\pm\,{\rm e}^{\mp{\rm i}\omega_0 t} \tag{17.88}$$

tandis que celles de $\tilde{a}(t)$ et $\tilde{a}^\dagger(t)$ sont données par (17.17). Les dépendances temporelles approchées des opérateurs qui apparaissent dans $W$ sont donc

$$\begin{aligned} &\tilde{\sigma}_-\tilde{a} \propto {\rm e}^{-{\rm i}\delta t} && \tilde{\sigma}_+\tilde{a}^\dagger \propto {\rm e}^{{\rm i}\delta t} \\ &\tilde{\sigma}_+\tilde{a}^\dagger \propto {\rm e}^{{\rm i}(\omega+\omega_0)t} && \tilde{\sigma}_+\tilde{a} \propto {\rm e}^{-{\rm i}(\omega+\omega_0)t} \end{aligned} \tag{17.89}$$

Les deux derniers termes de (17.89) oscillent rapidement en fonction du temps et correspondent à des transitions qui ne conservent pas l'énergie : par exemple, $\sigma_- a^\dagger$ correspond à l'émission d'un photon alors que l'atome passe de l'état fondamental à l'état excité. Au voisinage de la résonance, nous pouvons utiliser l'approximation séculaire et négliger ces termes. Il ne reste que les termes $\sigma_- a$ et $\sigma_+ a^\dagger$. Nous obtenons ainsi le *hamiltonien de Jaynes-Cummings*

$$\boxed{H_{\rm JC} = -\frac{1}{2}\,\hbar\omega_0\sigma_3 + \hbar\omega a^\dagger a + \frac{1}{2}\,\hbar\lambda(y)\left(\sigma_- a + \sigma_+ a^\dagger\right)} \tag{17.90}$$

Ce hamiltonien couple uniquement les niveaux $|\varphi_n^g\rangle$ et $\varphi_n^e\rangle$, et nous sommes donc ramenés à un système à deux niveaux.

En pratique, on envoie l'atome dans la cavité suivant une certaine trajectoire, et nous allons supposer que $\sin ky = 1$ le long de cette trajectoire. La *fréquence de Rabi du vide* $\Omega_R$ sera définie par

$$\Omega_R = \frac{2d}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} \tag{17.91}$$

Les éléments de matrice non diagonaux de $W$ se déduisent de

$$\langle\varphi_n^g|\sigma_+ a^\dagger|\varphi_n^e\rangle = \langle g\otimes(n+1)|\sigma_+ a^\dagger|e\otimes n\rangle = \sqrt{n+1}$$

où nous avons utilisé (10.16), et la forme matricielle de $H$ est

$$H = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\,\hbar\begin{pmatrix}\delta & \Omega_R\sqrt{n+1}\\ \Omega_R\sqrt{n+1} & -\delta\end{pmatrix} \tag{17.92}$$

Les vecteurs propres et valeurs propres (à une constante commune additive près) de ce hamiltonien sont

$$\begin{aligned} E_n^- &= -\frac{1}{2}\,\hbar\sqrt{\delta^2+(n+1)\Omega_R^2} \qquad & |\chi_n^-\rangle &= -\sin\theta_n|\varphi_n^g\rangle + \cos\theta_n|\varphi_n^e\rangle \\ E_n^+ &= \frac{1}{2}\,\hbar\sqrt{\delta^2+(n+1)\Omega_R^2} \qquad & |\chi_n^+\rangle &= \cos\theta_n|\varphi_n^g\rangle + \sin\theta_n|\varphi_n^e\rangle \end{aligned} \tag{17.93}$$

où l'angle $\theta_n$ est donné par

$$\tan 2\theta_n = \frac{\Omega_R\sqrt{n+1}}{\delta} \tag{17.94}$$

Les vecteurs $|\chi_n^-\rangle$ et $|\chi_n^+\rangle$ sont les vecteurs propres de *l'atome habillé* (par le champ électromagnétique). La figure 17.4 donne le schéma d'une expérience réalisée par Brune *et al.* [1996a]. Des atomes de rubidium préparés dans un état de Rydberg (exercice 15.4.4) $|g\rangle$ ou $|e\rangle$ passent d'abord dans une cavité micro-onde $R_1$ puis dans une cavité supraconductrice $C$ résonante à la fréquence $\omega_0$ et sont analysés dans une seconde cavité micro-onde $R_2$. Supposons qu'un atome dans l'état excité $|e\rangle$ entre dans la cavité au temps $t=0$, et que celle-ci soit vide ($n=0$). On se place à la résonance $\delta=0$, $\sin\theta_0=\cos\theta_0=1/\sqrt{2}$. L'état $|\varphi_0^e\rangle$ se décompose sur $|\chi_0^\pm\rangle$

$$|\varphi_0^e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\chi_0^+\rangle + |\chi_0^-\rangle\right) \tag{17.95}$$

et le vecteur d'état est donné au temps $t$ par

$$|\varphi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega_R t/2}|\chi_0^+\rangle + \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\Omega_R t/2}|\chi_0^-\rangle\right) \tag{17.96}$$

La probabilité de trouver au temps $t$ l'atome dans son état excité est

$$|\langle\varphi_0^e|\varphi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{4}\left|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega_R t/2} + \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\Omega_R t/2}\right|^2 = \cos^2\frac{\Omega_R t}{2} \tag{17.97}$$

Cette probabilité oscille en fonction de $t$ avec la fréquence de Rabi du vide $\Omega_R$ (17.91). Ces oscillations proviennent de l'interaction entre l'atome et le champ

électromagnétique quantifié, puisque la cavité est initialement vide, et ces oscillations sont appelées à juste titre *oscillations de Rabi du vide*. Ces oscillations ont été observées expérimentalement, ce qui fournit une preuve directe de la quantification du champ électromagnétique. L'expérience (figure 17.4) a été réalisée avec les données numériques suivantes

$$d = 1.1 \times 10^{-26}\,\text{cm} \qquad \frac{\omega}{2\pi} = 5.0 \times 10^{10}\,\text{Hz} \qquad \mathcal{V} = 1.87 \times 10^{-6}\,\text{m}^3$$

La valeur théorique calculée à partir de ces données est en bon accord avec la valeur mesurée expérimentalement à partir des oscillations $\Omega_R/(2\pi) = 47\,\text{kHz}$.

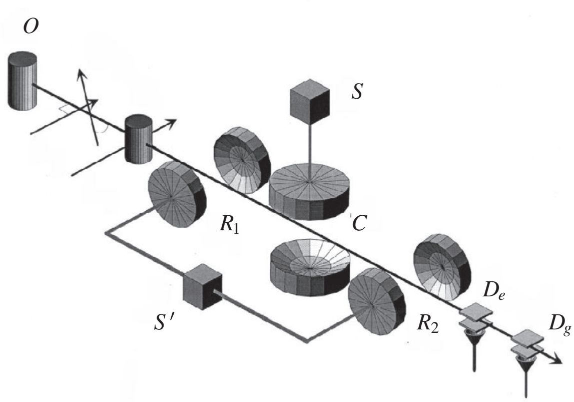



FIG. 17.4 – Les atomes sortent du four $O$ et traversent une première cavité micro-onde $R_1$. Ils traversent ensuite la cavité supraconductrice $C$ puis la seconde cavité micro-onde $R_2$. Les cavités $R_1$ et $R_2$ sont alimentées par la même source $S'$. Les atomes sont finalement détectés par les deux détecteurs à ionisation $D_e$ et $D_g$, qui sont déclenchés respectivement par les atomes dans les états $e$ ou $g$. D'après M. Brune *et al.* [1996].

## 17.3 Interaction atome-champ électromagnétique

Dans cette section, nous allons examiner l'interaction entre un champ électromagnétique et un atome, modélisé comme dans la section 15.2 par un électron externe dans un potentiel à symétrie sphérique, ce qui est un bon modèle pour un atome alcalin. En principe, nous devrions utiliser le champ électromagnétique quantifié introduit dans les sections précédentes, mais dans un premier temps, nous utiliserons une *approximation semi-classique*, déjà introduite dans la section 5.3 : le champ électromagnétique est décrit classiquement,

tandis que l'atome est décrit de façon quantique. Dans la section 5.3, nous avions postulé une interaction phénoménologique entre une onde électromagnétique et un dipôle électrique, responsable des transitions d'un niveau à un autre. Nous allons compléter ces résultats en justifiant l'approximation dipolaire et en donnant une expression explicite de l'amplitude de transition. À ce point, il vaut la peine de résumer dans la table 17.1 les diverses approximations possibles lorsque l'on étudie l'interaction atome (ou molécule)-champ électromagnétique.

| Champ électromagnétique | Atome | Exemples |
|---|---|---|
| classique | classique | rayonnement classique<br>§ 1.5.3 |
| classique | quantique | absorption et émission stimulées<br>§ 5.4.1, § 17.3.1 à § 17.3.3 |
| quantique | classique | couplage à une source classique<br>exercice 10.4.4 |
| quantique | quantique | émission spontanée<br>§ 15.3.3, § 17.3.4 |

TAB. 17.1 – Différents schémas d'approximation.

### 17.3.1 Théorie semi-classique

Suivant l'approche du § 17.1.2, l'onde électromagnétique classique est décrite dans la jauge de Coulomb $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ par un potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r}, t)$ transverse. Une onde plane de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de fréquence $\omega$ peut donc s'écrire

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \mathrm{Re}\left[\vec{A}_0 \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\right] \qquad \vec{k} \cdot \vec{A}_0 = 0 \tag{17.98}$$

Rappelons l'action des opérateurs divergence et rotationnel dans l'espace de Fourier

$$\vec{\nabla} \bullet \to \mathrm{i}\vec{k} \bullet \qquad \vec{\nabla} \times \bullet \to \mathrm{i}\vec{k} \times \bullet \tag{17.99}$$

ce qui donne pour les champs électrique et magnétique

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \mathrm{Re}\left[\mathrm{i}\omega \vec{A}_0 \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\right] \tag{17.100}$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \mathrm{Re}\left[\mathrm{i}(\vec{k} \times \vec{A}_0) \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\right] \tag{17.101}$$

Le flux d'énergie est donné par le vecteur de Poynting

$$\vec{\mathcal{S}} = \varepsilon_0 c^2\, \vec{E} \times \vec{B} \tag{17.102}$$

et en moyennant sur le temps, avec $\langle\cos^2(\omega t)\rangle = 1/2$

$$\langle\vec{\mathcal{S}}\rangle = \frac{1}{2}\varepsilon_0 c\,\omega^2|\vec{A}_0|^2\hat{k} = \mathcal{I}(\omega)\hat{k} \tag{17.103}$$

L'intensité $\mathcal{I}(\omega)$ est reliée au flux de photons $\mathcal{F}$ par

$$\mathcal{I}(\omega) = \hbar\omega\mathcal{F}$$

soit, en appelant $n$ la densité de photons

$$\mathcal{F} = nc = \frac{1}{2\hbar}\,\varepsilon_0 c\,\omega|\vec{A}_0|^2 \tag{17.104}$$

Le hamiltonien d'interaction électron+champ s'écrit d'après (10.61)

$$H = \frac{1}{2m_e}\left(\vec{P} - q_e\vec{A}(\vec{R},t)\right)^2 + V(\vec{R}) \tag{17.105}$$

$V(\vec{R})$ représente l'interaction effective de l'électron externe avec le noyau et les $(Z-1)$ électrons des couches internes. Le hamiltonien (17.105) se décompose en un hamiltonien non perturbé $H_0$

$$H_0 = \frac{1}{2m_e}\,\vec{P}^{\,2} + V(\vec{R}) \tag{17.106}$$

et une perturbation

$$W(\vec{R},t) = -\frac{q_e}{2m_e}\left(\vec{P}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\vec{P}\right) + \frac{q_e^2}{2m_e}\,\vec{A}^{\,2} \tag{17.107}$$

Au premier ordre en $q_e\vec{A}$, nous pouvons négliger le deuxième terme de (17.107), ou terme diamagnétique, $[q_e^2/(2m_e)]\vec{A}^{\,2}$ (exercice 15.4.5) ; de plus, le premier terme se simplifie dans la jauge de Coulomb $\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$ car

$$\begin{aligned}\vec{P}\cdot[\vec{A}f(\vec{r})] &= -\mathrm{i}\hbar(\vec{\nabla}\cdot\vec{A})f(\vec{r}) - \mathrm{i}\hbar\vec{A}\cdot\vec{\nabla}f(\vec{r})\\ &= -\mathrm{i}\hbar\vec{A}\cdot\vec{\nabla}f(\vec{r}) = (\vec{A}\cdot\vec{P})f(\vec{r})\end{aligned}$$

La perturbation $W(\vec{R},t)$ s'écrit en fin de compte

$$W(\vec{R},t) = -\frac{q_e}{m_e}\left[\vec{A}(\vec{R},t)\cdot\vec{P}\right] \tag{17.108}$$

Nous nous plaçons dans une représentation où $\vec{R}$ est diagonal : $\vec{R}\to\vec{r}$. Compte tenu de (17.98),

$$W(\vec{r},t) = -\frac{q_e}{2m_e}\left[\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\,\vec{A}_0\cdot\vec{P} + \mathrm{e}^{\,-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\,\vec{A}_0^*\cdot\vec{P}\right] \tag{17.109}$$

Nous pouvons maintenant utiliser les résultats du § 8.5.3 : le terme en $\exp(-\mathrm{i}\omega t)$ de (17.109) correspond à l'absorption d'énergie par l'atome et le terme en $\exp(\mathrm{i}\omega t)$ à l'émission d'énergie. S'il existe deux niveaux d'énergie $E_i$ et $E_f$, avec $E_i < E_f$, correspondant à une résonance : $E_f - E_i = \hbar\omega_0 \simeq \hbar\omega$, l'atome absorbera une énergie $\hbar\omega_0$ dans une transition $i \to f$, et émettra une énergie $\hbar\omega_0$ dans une transition $f \to i$. Dans une interprétation corpusculaire, cela veut bien sûr dire que l'atome absorbe ou émet un photon d'énergie $\hbar\omega_0$, mais cette interprétation sort du cadre de la théorie semi-classique. D'après (8.152), la probabilité par unité de temps d'absorption $i \to f$ est donnée par

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{q_e}{2m_e}\right)^2 \left|\langle f|\exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r})\,\vec{A}_0\cdot\vec{P}|i\rangle\right|^2 \delta(E_f - (E_i + \hbar\omega)) \qquad (17.110)$$

## 17.3.2 Approximation dipolaire

Introduisons un vecteur polarisation unitaire $\vec{e}_s$, $\vec{e}_s^{\,*}\cdot\vec{e}_s = 1$, en écrivant $\vec{A}_0 = |\vec{A}_0|\vec{e}_s$. L'intensité $\mathcal{I}(\omega)$ par unité de fréquence est donnée par (17.103)

$$\mathcal{I}(\omega) = \frac{1}{2}\,\varepsilon_0 c\omega^2|\vec{A}_0(\omega)|^2$$

Récrivons (17.110) en intégrant sur $\omega$ et en séparant le module carré de l'élément de matrice de transition des caractéristiques de l'onde incidente

$$\begin{aligned}\Gamma_{fi} &= \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{q_e}{2m_e}\right)^2 \int \mathrm{d}\omega\,|\vec{A}_0(\omega)|^2 \left|\vec{e}_s\cdot\langle f|\exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r})\,\vec{P}|i\rangle\right|^2 \delta(E_f - (E_i + \hbar\omega)) \\ &= \frac{4\pi^2\alpha}{\hbar\omega_0^2 m_e^2}\,\mathcal{I}(\omega_0)\left|\vec{e}_s\cdot\langle f|\exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r})\,\vec{P}|i\rangle\right|^2 \qquad (17.111)\end{aligned}$$

L'élément de matrice de transition dans (17.111) se simplifie si l'on remarque que la longueur d'onde émise ou absorbée, $0.1\,\mu\mathrm{m} \lesssim \lambda \lesssim 1\,\mu\mathrm{m}$, est très grande par rapport aux dimensions atomiques $a_0 \sim 0.1\,\mathrm{nm}$, ce qui permet de remplacer $\exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r})$ par 1 car $\langle\vec{k}\cdot\vec{r}\rangle \sim ka_0 \sim a_0/\lambda \ll 1$

$$\begin{aligned}\langle f|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\,\vec{P}|i\rangle &= \int \mathrm{d}^3r\,\varphi_f^*(\vec{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\left(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}\right)\varphi_i(\vec{r}) \\ &\simeq \int \mathrm{d}^3r\,\varphi_f^*(\vec{r})\left(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}\right)\varphi_i(\vec{r})\end{aligned}$$

De plus, on peut exprimer $\vec{P}$ à l'aide de la relation de commutation entre $\vec{R}$ et $H_0$

$$[\vec{R}, H_0] = \frac{\mathrm{i}\hbar}{m_e}\,\vec{P}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned}\langle f|\vec{P}|i\rangle &= \frac{m_e}{\mathrm{i}\hbar}\,\langle f|\vec{R}H_0 - H_0\vec{R}|i\rangle \\ &= \frac{m_e}{\mathrm{i}\hbar}\,(E_i - E_f)\langle f|\vec{R}|i\rangle = \mathrm{i}m_e\omega_0\langle f|\vec{R}|i\rangle \qquad (17.112)\end{aligned}$$

En physique classique, $\vec{r}$ est le vecteur joignant le noyau situé à l'origine des coordonnées à l'électron externe, et $q_e\vec{r}$ est le moment dipolaire électrique $\vec{d}$ de l'atome. La quantité $\langle f|q_e\vec{R}|i\rangle$ est donc *l'élément de matrice $\vec{D}_{fi}$ de l'opérateur moment dipolaire électrique $\vec{D} = q_e\vec{R}$* entre les états $|i\rangle$ et $|f\rangle$

$$\vec{D}_{fi} = \langle f|\vec{D}|i\rangle = q_e\langle f|\vec{R}|i\rangle \tag{17.113}$$

En reportant ces résultats dans (17.111), on obtient la probabilité de transition par unité de temps pour une polarisation $\vec{e}_s$

$$\Gamma_{fi} = 4\pi^2 \left(\frac{\left|\vec{e}_s \cdot \vec{D}_{fi}\right|^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 c}\right)\mathcal{I}(\omega_0) \tag{17.114}$$

$$= \frac{4\pi^2\alpha}{\hbar}\left|\vec{e}_s \cdot \vec{R}_{fi}\right|^2\mathcal{I}(\omega_0) \tag{17.115}$$

en accord avec (5.69) : le moment dipolaire $d$ introduit phénoménologiquement dans le § 5.3.2 prend une forme explicite pour l'atome à un électron

$$d^2 \to \left|\vec{e}_s \cdot \vec{D}_{fi}\right|^2 = q_e^2\left|\vec{e}_s \cdot \vec{R}_{fi}\right|^2$$

L'expression (17.114) est plus générale que (17.115), et elle est valable pour tout système atomique ou moléculaire lorsque les règles de sélection des transitions dipolaires électriques sont satisfaites : la probabilité de transition est pilotée par l'élément de matrice de transition du dipôle électrique du système, qui fait intervenir toutes les particules chargées. Un calcul identique permet de déduire le taux d'émission stimulée $\overline{\Gamma}_{if}$, qui est aussi donné par (17.114) : $\overline{\Gamma}_{if} = \Gamma_{fi}$. En effet il suffit de remplacer $D_{fi}$ par $D_{if} = D^*_{fi}$ pour passer de l'absorption à l'émission. Suivant l'argument fondé sur les relations d'Einstein du § 5.4.1, on déduit de $\Gamma_{fi}$ la probabilité d'émission spontanée d'un photon en sommant sur les deux états possibles de polarisation : $s = 1, 2$ et en prenant la moyenne $\langle\bullet\rangle$ sur les angles et sur les spins

$$B' = \frac{4\omega_0^3}{c^2}\left(\frac{\frac{1}{2}\sum_{s=1}^{2}\langle\left|\vec{e}_s \cdot \vec{D}_{fi}\right|^2\rangle}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right) = \frac{2\alpha\omega_0^3}{c^2}\left\langle\sum_{s=1}^{2}\left|\vec{e}_s \cdot \vec{R}_{fi}\right|^2\right\rangle \tag{17.116}$$

L'opérateur moment dipolaire électrique $\vec{D}$, tout comme l'opérateur position $\vec{R}$, est un opérateur vectoriel impair. Cette propriété de $\vec{D}$ implique des *règles de sélection* pour les transitions dipolaires électriques. En effet, le théorème de Wigner-Eckart pour les opérateurs vectoriels donne l'expression des éléments de matrice des composantes sphériques (9.145) $D_q$ de $\vec{D}$ : si $j_i$ et $j_f$ sont les moments angulaires de l'état initial $i$ et de l'état final $f$, et $m_i$ et $m_f$ les nombres quantiques magnétiques, nous obtenons de (9.149)

$$\langle j_f m_f|D_q|j_i m_i\rangle = C^{1j_i}_{qm_i;j_f m_f}\langle j_f||D||j_i\rangle \tag{17.117}$$

Le coefficient de Clebsch-Gordan ne peut être différent de zéro que si $|j_i - 1| \leq j_f \leq j_i + 1$ et si $m_f = q + m_i$. De plus, les parités de l'état initial et de l'état final doivent être opposées : $\Pi_i \Pi_f = -1$. Les transitions dipolaires électriques obéissent donc aux règles de sélection suivantes.
*Règles de sélection pour les transitions dipolaires électriques*

$$\boxed{|j_i - 1| \leq j_f \leq j_i + 1 \qquad m_f = m_i + q,\ q = -1, 0, +1 \qquad \Pi_i \Pi_f = -1}$$

Ceci généralise les résultats obtenus au § 9.5.2 dans le cas particulier $j_i = 1$ et $j_f = 0$. Les règles de sélection sur le nombre quantique magnétique $m$ sont directement liées à la conservation du moment angulaire suivant $Oz$, et des exemples en ont déjà été donnés au § 9.5.2 et dans l'exercice 9.7.13.

## 17.3.3 Effet photoélectrique

Dans la sous-section précédente, nous avons étudié la transition entre deux niveaux en généralisant les résultats de la section 5.3. Nous allons maintenant nous intéresser à une transition vers le spectre continu : une onde électromagnétique de fréquence $\omega > R_\infty/\hbar$ et de polarisation $\vec{e}_s$ arrive sur un atome d'hydrogène dans son état fondamental. Dans un langage corpusculaire, la condition $\omega > R_\infty/\hbar$ implique que l'énergie des photons est suffisante pour ioniser l'atome en éjectant son électron, ce qui donne un exemple très simple d'effet photoélectrique, et un cas où l'on peut mener jusqu'au bout des calculs analytiques. D'après la règle d'or de Fermi et la définition (13.1) de la section efficace, la section efficace de production des photo-électrons est, au premier ordre de la théorie des perturbations en $W$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar \mathcal{F}} \, |\langle f|W|i\rangle|^2 \, \frac{\mathcal{V} m_e k_e}{(2\pi)^3 \hbar^2} \tag{17.118}$$

où $\vec{k}_e$ est le vecteur d'onde de l'électron final. Lorsque $\hbar\omega \gg R_\infty$ (mais $\hbar\omega \ll m_e c^2$ de façon à préserver une cinématique non relativiste et à prévenir la production de paires électron-positron[12]), on peut négliger l'interaction de l'électron final avec le proton et prendre pour état final une onde plane : c'est l'approximation de Born

$$\langle \vec{r}\,|f\rangle = \varphi_f(\vec{r}\,) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}\, \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}_e \cdot \vec{r}}$$

Notons que l'approximation dipolaire n'est pas valable si l'énergie du photon est trop grande. L'état initial est décrit par la fonction d'onde (15.31) de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène. L'élément de matrice $\langle f|W|i\rangle$ est donné par (17.110)

$$\langle f|W|i\rangle = \left(-\frac{q_e}{2m_e}\right) \, |\vec{A}_0| \, \vec{e}_s \cdot \int \mathrm{d}^3 r \, \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}(\vec{k} - \vec{k}_e)\cdot \vec{r}} \, \left(-\mathrm{i}\hbar \vec{\nabla} \varphi_i(\vec{r}\,)\right)$$

12. Cette approximation est valable dans le cas des rayon X, dont l'énergie va de 1 à 100 keV.

soit, en intégrant par parties et en remarquant que $\vec{e}_s \cdot \vec{k} = 0$

$$\begin{aligned}\langle f|W|i\rangle &= \left(-\frac{q_e}{2m_e}\right)|\vec{A}_0|\,\frac{\hbar(\vec{e}_s\cdot\vec{k}_e)}{\sqrt{\mathcal{V}\pi a_0^3}}\int \mathrm{d}^3r\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}(\vec{k}-\vec{k}_e)\cdot\vec{r}}\;\mathrm{e}^{-r/a_0}\\ &= \left(-\frac{q_e}{2m_e}\right)|\vec{A}_0|\,\frac{\hbar(\vec{e}_s\cdot\vec{k}_e)}{\sqrt{\mathcal{V}\pi a_0^3}}\,\frac{8\pi/a_0}{(q^2+1/a_0^2)^2}\end{aligned} \tag{17.119}$$

où nous avons défini $\vec{q}=\vec{k}-\vec{k}_e$ : $\hbar\vec{q}$ est le transfert d'impulsion entre le photon initial et l'électron final. Pour calculer l'intégrale dans (17.119), nous avons utilisé (16.6)

$$\int \mathrm{d}^3r\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\;\mathrm{e}^{-\lambda r} = \frac{8\pi\lambda}{(\lambda^2+q^2)^2}$$

Rassemblant tous les facteurs dans (17.118), on obtient

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{32\alpha\hbar}{m_e\,\omega\,a_0^5}\,\frac{|\vec{e}_s\cdot\hat{k}_e|^2\,k_e^3}{\left[(\vec{k}-\vec{k}_e)^2+1/a_0^2\right]^4}} \tag{17.120}$$

Explicitons (17.120) en choisissant $\vec{k}$ parallèle à $Oz$ et une polarisation linéaire $\vec{e}_s$ parallèle à $Ox$ ; soit $(\Omega=\theta,\phi)$ les angles polaires définissant $\hat{k}_e$

$$(\vec{e}_x\cdot\hat{k}_e)^2 = \sin^2\theta\cos^2\phi$$

Cette quantité est maximale lorsque $\vec{e}_x$ et $\vec{k}_e$ sont parallèles, soit $\theta=\pi/2$ et $\phi=0$ ou $\pi$. Le dénominateur dans (17.120) varie lentement avec $\theta$, car, dans les conditions cinématiques définies ci-dessus, on déduit de la conservation de l'énergie

$$\frac{k}{k_e}\simeq\frac{\hbar k_e}{2m_ec}=\frac{v_e}{2c}\ll 1$$

où $v_e$ est la vitesse des photoélectrons, et

$$(\vec{k}-\vec{k}_e)^2\simeq k_e^2\left(1-\frac{v_e}{c}\cos\theta\right)$$

Les électrons sont donc éjectés de façon préférentielle dans un plan perpendiculaire au vecteur d'onde incident et parallèlement au champ électrique de l'onde. Si l'onde incidente n'est pas polarisée, on doit ajouter de façon incohérente les contributions des polarisations suivant $Ox$ et $Oy$ et faire la moyenne

$$\frac{1}{2}\left[(\vec{e}_x\cdot\hat{k}_e)^2+(\vec{e}_y\cdot\hat{k}_e)^2\right]=\frac{1}{2}\sin^2\theta$$

ce qui donne toujours une émission préférentielle dans le plan perpendiculaire à $\vec{k}$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\text{non pol}} = \frac{16\alpha\hbar}{m_e\omega a_0^5}\,\frac{k_e^3\sin^2\theta}{\left[(\vec{k}-\vec{k}_e)^2+1/a_0^2\right]^4}\simeq\frac{16\alpha\hbar}{m_e\,\omega\,a_0^5\,k_e^5}\,\frac{\sin^2\theta}{\left[1-\dfrac{v_e}{c}\cos\theta\right]^8} \tag{17.121}$$

Dans les conditions cinématiques choisies, on peut négliger $1/a_0^2$ par rapport à $q^2$, car

$$\frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e} \gg R_\infty = \frac{e^2}{2a_0} \Rightarrow (k_e a_0)^2 \gg \frac{m_e e^2}{\hbar^2}\, a_0 = 1$$

Une remarque importante est que nous avons pu traiter l'effet photoélectrique dans un cadre semi-classique, sans introduire le concept de photon, contrairement à une idée largement répandue selon laquelle ce concept est nécessaire pour expliquer l'effet de seuil (§ 1.3.2). Dans l'approche semi-classique, l'effet de seuil est dû à la condition de résonance : l'effet photoélectrique n'est appréciable que si l'onde lumineuse est en résonance entre le niveau fondamental $E_0$ et un niveau $E_C$ du spectre continu : $E_C - E_0 = \hbar\omega$. L'effet photoélectrique s'explique sans photon, mais pas sans $\hbar$ !

### 17.3.4 Champ électromagnétique quantifié : émission spontanée

Nous avons souvent fait appel à la notion de photon pour l'interprétation intuitive des résultats de la théorie semi-classique, bien qu'à strictement parler ce concept soit étranger à cette théorie. À moins d'utiliser un argument détourné[13] comme celui du § 5.4.1, on ne peut pas calculer la probabilité d'émission spontanée par un atome dans un état excité, car il n'y a pas de champ électromagnétique classique préexistant et le terme d'interaction $\propto \vec{A} \cdot \vec{P}$ est nul. Il est nécessaire de faire appel au concept de champ électromagnétique quantifié développé dans la section 17.1, car les opérateurs d'annihilation $a_{\vec{k}s}$ et de création $a^\dagger_{\vec{k}s}$ sont susceptibles de changer le nombre de photons. De façon plus précise, si $n_{\vec{k}s}$ est le nombre de photons dans le mode de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de polarisation $s$, nous allons nous intéresser aux transitions avec émission d'un photon : $n_{\vec{k}s} \to n_{\vec{k}s} + 1$ ou avec absorption d'un photon : $n_{\vec{k}s} \to n_{\vec{k}s} - 1$, l'émission spontanée dans le mode $(\vec{k}, s)$ correspondant au cas $n_{\vec{k}s} = 0$. Rappelons le développement du champ électromagnétique quantifié (17.48) à $t = 0$ dans un volume $L^3 = \mathcal{V}$

$$\vec{\mathsf{A}}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \mathcal{V}}}\, \sum_{\vec{k}} \sum_{s=1}^{2} \frac{1}{\sqrt{\omega_k}} \Big( a_{\vec{k}s} \vec{e}_s(\hat{k})\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + a^\dagger_{\vec{k}s} \vec{e}^{\,*}_s(\hat{k})\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \Big)$$

13. Cet argument utilise la distribution de Planck, qui contient implicitement le concept de photon : en effet, la probabilité d'occupation d'un mode du champ électromagnétique est donnée par la théorie quantique de l'oscillateur harmonique. Il n'est donc pas surprenant que l'on puisse en déduire l'émission spontanée.

Le couplage entre le champ électromagnétique[14] et l'atome est, au premier ordre en $\vec{\mathsf{A}}$

$$W = -\frac{q_e}{m_e}\,\vec{\mathsf{A}}\cdot\vec{P} \tag{17.122}$$

Ce couplage *indépendant du temps* $\vec{\mathsf{A}}\cdot\vec{P}$ fait intervenir les termes

$$a_{\vec{k}s}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\left(\vec{e}_s(\hat{k})\cdot\vec{P}\right) \tag{17.123}$$

et

$$a^\dagger_{\vec{k}s}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\left(\vec{e}^{\,*}_s(\hat{k})\cdot\vec{P}\right) \tag{17.124}$$

Le terme (17.123) détruit un photon et le terme (17.124) crée un photon dans le mode $(\vec{k},s)$. Soit $|i,n_{\vec{k}s}\rangle$, un état initial où $i$ décrit l'état de l'atome et $|f,n_{\vec{k}s}\pm 1\rangle$, un état final. Les éléments de matrice non nuls de $a_{\vec{k}s}$ et $a^\dagger_{\vec{k}s}$ sont donnés par (10.16) et (10.17)

$$\begin{aligned}\langle n_{\vec{k}s}+1|a^\dagger_{\vec{k}s}|n_{\vec{k}s}\rangle &= \sqrt{n_{\vec{k}s}+1}\\ \langle n_{\vec{k}s}-1|a_{\vec{k}s}|n_{\vec{k}s}\rangle &= \sqrt{n_{\vec{k}s}}\end{aligned} \tag{17.125}$$

Nous allons examiner l'émission spontanée correspondant au cas $n_{\vec{k}s}=0$ et nous reviendrons brièvement sur l'absorption et l'émission induites en fin de sous-section. La quantité physique intéressante est la probabilité par unité de temps pour que l'atome émette un photon de vecteur d'onde $\simeq\vec{k}$ et de polarisation $s$ dans un angle solide $\mathrm{d}\Omega$, $\Omega=(\theta,\phi)$, autour[15] de $\vec{k}$. Pour obtenir cette probabilité, nous avons besoin de la densité d'états du photon

$$\mathcal{D}(\omega) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3}\,\mathrm{d}^3k = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3c^3}\,\omega^2\,\mathrm{d}\omega\,\mathrm{d}\Omega \tag{17.126}$$

avec $\omega_k\to\omega$. La probabilité de transition par unité de temps est donnée par la règle d'or de Fermi (8.152) avec un photon final $(\vec{k},s)$ d'énergie $\hbar\omega$

$$\mathrm{d}\Gamma^s_{fi}(\vec{k},s) = \frac{2\pi}{\hbar}\,|\langle f,n_{\vec{k}s}=1|W|i,n_{\vec{k}s}=0\rangle|^2\delta(\hbar\omega-(E_i-E_f))\frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3c^3}\,\omega^2\,\mathrm{d}\omega\,\mathrm{d}\Omega \tag{17.127}$$

14. On doit prendre le champ électromagnétique (17.33) à $t=0$, c'est-à-dire dans le point de vue de Schrödinger $\vec{\mathsf{A}}_S=\vec{\mathsf{A}}_H(t=0)=\vec{\mathsf{A}}$, car nous utilisons le point de vue de Schrödinger dans les calculs perturbatifs et les *opérateurs* $\vec{\mathsf{A}}$ et $\vec{P}$ doivent être pris dans ce point de vue. Dans les § 17.3.1 à 17.3.3, la dépendance par rapport au temps du champ classique est fixée par une source externe, celle qui produit l'onde électromagnétique incidente, alors que le champ quantifié est indépendant de toute source extérieure.

15. En toute rigueur, on doit préciser que l'on se place dans le référentiel où l'atome initial est au repos. La conservation de l'énergie implique dans ce référentiel

$$E_i - E_f = \hbar\omega + \frac{\hbar^2k^2}{2M_{\rm at}}$$

Le deuxième terme est l'énergie de recul, qui a été discutée au § 15.3.3. En général, cette énergie de recul est négligeable : tout se passe comme si l'atome était infiniment lourd, $M_{\rm at}\to\infty$.

l'élément de matrice $\langle f, n_{\vec{k}s} = 1|W|i, n_{\vec{k}s} = 0\rangle$ étant donné par (contrairement au § 17.3.3, nous avons maintenant $E_i > E_f$ et $\hbar\omega_0 = E_i - E_f$)

$$\begin{aligned}\langle f, n_{\vec{k}s} = 1|W|i, n_{\vec{k}s} = 0\rangle &= -\frac{q}{m_e}\,\langle f, n_{\vec{k}s} = 1|\vec{\mathsf{A}}\cdot\vec{P}|i, n_{\vec{k}s} = 0\rangle \\ &= -\frac{q}{m_e}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\mathcal{V}\omega}}\,\langle f, n_{\vec{k}s} = 1| \\ &\quad\times a^{\dagger}_{\vec{k}s}\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\left(\vec{e}^{\,*}_s(\hat{k})\cdot\vec{P}\right)|i, n_{\vec{k}s} = 0\rangle \\ &\simeq \mathrm{i}q_e\omega_0\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega\mathcal{V}}}\langle f|\left(\vec{e}^{\,*}_s(\hat{k})\cdot\vec{R}\right)|i\rangle \qquad (17.128)\end{aligned}$$

Nous avons utilisé l'approximation dipolaire $\exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}) \simeq 1$ et exprimé l'élément de matrice de $\vec{P}$ à l'aide de (17.112).

Pour obtenir la probabilité d'émission d'un photon dans l'angle solide $\mathrm{d}\Omega$, il faut intégrer (17.127) sur $\omega$ ; la fonction $\delta$ fixe l'énergie du photon à

$$\hbar\omega = E_i - E_f = \hbar\omega_0$$

ce qui donne, en utilisant (17.128) et en définissant $\vec{R}_{fi} = \langle f|\vec{R}\,|i\rangle$

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma^s_{fi}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\alpha\omega_0^3}{2\pi c^2}\left|\vec{e}^{\,*}_s(\hat{k})\cdot\vec{R}_{fi}\right|^2 \qquad (17.129)$$

Une expression équivalente utilise le moment dipolaire $\vec{D} = q_e\vec{R}$

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma^s_{fi}}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)\left(\frac{\omega_0^3}{2\pi\hbar c^3}\right)\left|\vec{e}^{\,*}_s(\hat{k})\cdot\vec{D}_{fi}\right|^2 \qquad (17.130)$$

Pour obtenir la probabilité totale de transition $\Gamma$, qui est l'inverse de la vie moyenne $\tau$ de l'état excité : $\tau = 1/\Gamma$, il faut intégrer sur $\Omega$ et sommer sur les deux états de polarisation

$$\Gamma = \frac{1}{\tau} = \sum_{s=1}^{2}\int\frac{\mathrm{d}\Gamma^s_{fi}}{\mathrm{d}\Omega}\,\mathrm{d}\Omega \qquad (17.131)$$

Partons de cette équation et revenons brièvement sur le calcul conduisant à l'équation (5.78) en récrivant (17.130) sous la forme

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\,\frac{\omega_0^3}{2\pi c^2}\left|\vec{e}^{\,*}_s\cdot\vec{D}_{fi}\right|^2$$

Supposons comme dans le § 5.4.1 que le dipôle ne puisse osciller que dans la direction $\hat{z}$, $\vec{D}_{fi} = d\hat{z}$, et choisissons $\vec{e}_s$ réel. La somme sur les polarisations donne

$$(\hat{z}\cdot\vec{e}_1)^2 + (\hat{z}\cdot\vec{e}_2)^2 = 1 - (\hat{z}\cdot\hat{k})^2$$

et l'intégration sur les angles

$$\int \mathrm{d}\Omega\, \sin^2\theta = \frac{8\pi}{3}$$

On en déduit (5.78)

$$\Gamma = \frac{4\omega_0^3}{3c^2}\left(\frac{d^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)$$

Revenons maintenant au cas général : afin de calculer l'élément de matrice sous la forme (17.129) par exemple, nous allons nous placer dans une représentation où $\vec{R}$ est diagonal[16]

$$\vec{R}_{fi} = \int \mathrm{d}^3r\, \varphi_f^*(\vec{r})\, \vec{r}\, \varphi_i(\vec{r}) \tag{17.132}$$

et nous allons séparer la partie radiale dépendant de $r$ et la partie angulaire dépendant de $\hat{r}$ dans l'intégrale (17.132) en écrivant $\vec{r} = r\hat{r}$. Afin de traiter un cas concret, nous prenons comme exemple la transition $2p \to 1s$ de l'atome d'hydrogène[17]. La fonction d'onde initiale s'écrit en fonction de sa partie radiale (9.96) et de sa partie angulaire qui est l'harmonique sphérique $Y_1^m(\hat{r})$

$$\varphi_i^m(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{4!a_0^5}}\, r\, \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_1^m(\hat{r}) \tag{17.133}$$

tandis que la fonction d'onde finale est donnée par (15.31). Il est commode d'introduire les composantes sphériques (9.64) des vecteurs $\vec{e}_s(\hat{k})$ et $\vec{r}$ et de remarquer[18] que le produit scalaire $\vec{e}_s^{\,*}\cdot\hat{r}$ vaut

$$\vec{e}_s^{\,*}\cdot\hat{r} = (\vec{e}_s\cdot\hat{r})^* = \Big(\sum_{q=\pm1,0} e_{sq}^*\hat{r}_q\Big)^* = \sum_{q=\pm1,0} e_{sq}\hat{r}_q^*$$

D'autre part, le projecteur (17.30) orthogonal à $\vec{k}$ s'écrit en coordonnées sphériques

$$\sum_{s=1}^{2} e_{sq}(\hat{k})e_{sq'}^*(\hat{k}) = \delta_{qq'} - \hat{k}_q\hat{k}_{q'}^*$$

ce qui donne pour la partie angulaire

$$\Big|\sum_s \vec{e}_s^{\,*}(\hat{k})\cdot\langle f|\hat{r}|i\rangle\Big|^2 = \sum_{qq'}(\delta_{qq'} - \hat{k}_q\hat{k}_{q'}^*)\langle f|\,\hat{r}_q^*\,|i\rangle\langle i|\,\hat{r}_{q'}\,|f\rangle$$

---

16. Afin de simplifier les formules, nous ne tenons pas compte du spin, dont on montre facilement qu'il ne joue aucun rôle.

17. Dans le cas général d'un état initial $i$ de moment angulaire $(j_i, m_i)$ et d'un état final $f$ de moment angulaire $(j_f, m_f)$, on utilisera le théorème de Wigner-Eckart pour exprimer l'élément de matrice des composantes sphériques $D_q$ de $\vec{D}$ sous la forme (17.117).

18. Le produit scalaire de deux vecteurs $\vec{a}$ et $\vec{b}$ est donné en fonction de leurs coodonnées sphériques par

$$\vec{a}\cdot\vec{b} = \sum_{q=\pm1,0} a_q^* b_q = \sum_{q=\pm1,0} (-1)^q\, a_{-q}b_q$$

L'élément de matrice $\langle f|\,\hat{r}_q^*\,|i\rangle$ se calcule aisément en remarquant que, d'après (9.64), $\hat{r}_q$ est proportionnel à l'harmonique sphérique $Y_1^q(\hat{r})$ ; si le nombre quantique magnétique de l'état initial est $m$

$$\langle f|\hat{r}_q^*|i,m\rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\int \mathrm{d}^2\hat{r}\ [Y_1^q(\hat{r})]^*\,Y_1^m(\hat{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,\delta_{qm}$$

en utilisant les relations d'orthogonalité (9.55) des harmoniques sphériques, d'où

$$\Big|\sum_s \vec{e}_s^{\,*}(\hat{k})\cdot\langle f|\,\hat{r}\,|i\rangle\Big|^2 = \frac{4\pi}{3}\,(1-|\hat{k}_m|^2)$$

Le facteur $(1-|\hat{k}_m|^2)$ vaut $(1-\frac{1}{2}\sin^2\theta)$ pour $m=\pm 1$ et $(1-\cos^2\theta)$ pour $m=0$, ce qui donne la distribution angulaire du photon émis si l'état initial a une valeur de $m$ bien déterminée. Si l'état initial est non polarisé, on vérifie que la distribution angulaire est bien sûr isotrope, puisqu'il n'y a pas de direction privilégiée

$$\frac{1}{3}\left[2\left(1-\frac{1}{2}\sin^2\theta\right)+(1-\cos^2\theta)\right] = \frac{2}{3}$$

Pour obtenir la probabilité totale de transition (17.131), on intègre sur $\Omega$ et le résultat est le même dans les trois cas $m=\pm 1, 0$

$$\int \mathrm{d}\Omega\,\left(1-\frac{1}{2}\sin^2\theta\right) = \int \mathrm{d}\Omega\,(1-\cos^2\theta) = \frac{8\pi}{3}$$

La partie angulaire donne donc en tout un facteur $32\pi^2/9$. La partie radiale de l'élément de matrice vaut d'après (15.31) et (17.133)

$$\langle f|r|i\rangle = \frac{1}{a_0^4\sqrt{4!\pi}}\int_0^\infty r^4\mathrm{d}r\,\exp\left(-\frac{3r}{2a_0}\right) = \sqrt{\frac{4!}{\pi}}\left(\frac{2}{3}\right)^5 a_0$$

La combinaison des résultats précédents donne la probabilité de transition $\Gamma(2p\to 1s)$

$$\boxed{\Gamma(2p\to 1s) = \left[\frac{\alpha\omega_0^3}{2\pi c^2}\right]\left[\frac{4!}{\pi}\left(\frac{4}{9}\right)^5 a_0^2\right]\left[\frac{32\pi^2}{9}\right]} \tag{17.134}$$

et compte tenu de

$$\omega = \frac{3}{4}\,\frac{R_\infty}{\hbar} = \frac{3}{8}\,\frac{\alpha^2 m_e c^2}{\hbar} \quad \text{et de} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m c}$$

on peut mettre le résultat sous la forme finale, en rappelant (*cf.* § 1.5.3) que $\hbar/(m_e c^2) = 1.29\times 10^{-21}\,\mathrm{s}$

$$\Gamma(2p\to 1s) = \alpha^5\left(\frac{m_e c^2}{\hbar}\right)\left(\frac{4}{9}\right)^4 \simeq 6.2\times 10^8\,\mathrm{s}^{-1} \qquad \tau = \frac{1}{\Gamma}\simeq 1.6\times 10^{-9}\,\mathrm{s} \tag{17.135}$$

Revenons sur l'aspect qualitatif de ces résultats. Partant de (17.116) ou de (17.129) avec $|\vec{e}_s^{\,*} \cdot R_{fi}| \sim a$, où $a$ est une dimension caractéristique de l'atome ($a \simeq 10^{-10}$ m), nous obtenons l'estimation de la largeur de raie

$$\Gamma \sim \frac{\alpha\omega_0^3}{c^2}\, a^2 = \alpha \left(\frac{a\omega_0}{c}\right)^2 \omega_0 \sim \alpha^3 \omega_0 \sim \alpha^5 \left(\frac{m_e c^2}{\hbar}\right)$$

En effet, la vitesse $v$ de l'électron sur son orbite[19] est $v \sim \alpha c$ . La fréquence caractéristique $\omega_0$ est donnée par $\hbar\omega_0 \sim 1\,\mathrm{eV}$, soit $\omega_0 \sim 1.5 \times 10^{15}\,\mathrm{rad.s}^{-1}$, et la vie moyenne $\tau$ de l'état excité est estimée à

$$\tau = \frac{1}{\Gamma} \sim 2 \times 10^{-9}\,\mathrm{s}$$

La vie moyenne d'états excités se désexcitant par transition dipolaire électrique est effectivement comprise entre $\sim 10^{-7}$ et $\sim 10^{-9}$ s. Il est instructif d'examiner également le cas d'un niveau excité d'un noyau se désintégrant par émission d'un photon $\gamma$. L'énergie typique d'un tel photon est $\sim 1\,\mathrm{MeV}$, ce qui correspond à une longueur d'onde $\lambda \simeq 10^{-12}$ m. Comme les dimensions du noyau sont de l'ordre du fermi (ou femtomètre), $R \simeq 10^{-15}$ m, le rapport $R/\lambda \ll 1$ et l'approximation dipolaire électrique est *a priori* justifiée. Pour estimer la vie moyenne, il faut multiplier le résultat de physique atomique par un facteur $10^{-18}$ pour tenir compte du changement d'échelle d'énergie : 1 eV$\to$ 1 MeV, et par un facteur $10^{10}$ pour tenir compte du changement de dimension : $a \to R$, soit en tout un facteur $10^{-8}$. L'estimation pour la vie moyenne de l'état excité d'un noyau est donc

$$\tau_{\text{noyau}} \sim 10^{-8}\, \tau_{\text{atome}} \;\sim 10^{-15}\,\mathrm{s}$$

Un exemple est la désintégration d'un état excité de l'isotope 13 de l'azote

$$^{13}\mathrm{N}^* \to {}^{13}\mathrm{N} + \gamma \ (2.38\ \mathrm{MeV})$$

dont la vie moyenne est de $10^{-15}$ s, en accord qualitatif avec notre estimation.

Revenons brièvement pour conclure à l'émission et l'absorption stimulées. Si l'on prend en compte les facteurs (17.125)$-$(17.126) pour l'absorption et l'émission stimulées, il n'y a aucune modification à la probabilité d'absorption (17.114). En revanche, si l'atome se trouve dans une cavité de volume $\mathcal{V}$ contenant $\mathcal{N}_{\vec{k}s}$ photons dans le mode $(\vec{k}, s)$, la probabilité semi-classique d'émission est proportionnelle à la densité $n_{\vec{k}s} = \mathcal{N}_{\vec{k}s}/\mathcal{V}$ de photons, alors que l'utilisation du champ quantifié donne un facteur $(\mathcal{N}_{\vec{k}s} + 1)/\mathcal{V}$. La correction est en général négligeable, sauf dans le cas des cavités micro-ondes supraconductrices où le nombre de photons est petit (§ 17.2.3).

19. Les facteurs supposés "voisins de l'unité" de ce type d'estimation ne le sont pas toujours : l'estimation ci-dessus diffère de la valeur exacte (17.135) par un facteur $(8/3)(4/9)^4 \simeq 1/10$ !

### 17.3.5 Décohérence par émission de photons

L'émission spontanée de photons par un atome (ou une molécule, un noyau atomique...) est un processus dissipatif (irréversible)

$$\text{atome } (i) \rightarrow \text{atome } (f) + \text{photon } (\vec{k}, \vec{e}_s)$$

Ce processus s'étudie grâce à la méthode de Wigner-Weisskopf (annexe B), qui montre que le vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ est donné pour des temps longs par

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\vec{k},\vec{e}_s} |f, -\hbar\vec{k}; \vec{k}, \vec{e}_s\rangle \frac{W_{fi}/\hbar}{\omega - \tilde{\omega}_0 + \mathrm{i}\Gamma/2}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_f + \hbar\omega + E_R)t/\hbar} \tag{17.136}$$

Dans cette équation, $\Gamma^{-1}$ est la vie moyenne de l'état excité, $E_R = \hbar^2 k_0^2/2M$ l'énergie de recul, $\vec{k}$ le vecteur d'onde du photon émis, $\omega = ck$, $\hbar\omega_0 = E_i - E_f$ et $\vec{e}_s$ sa polarisation ; typiquement $\Gamma^{-1} \sim 10^{-8}\,$s. L'état final du photon est $|\vec{k}, \vec{e}_s\rangle$ : son impulsion est $\hbar\vec{k}$. L'état interne $|f\rangle$ de l'atome possède, par conservation de l'impulsion, une impulsion $-\hbar\vec{k}$ si l'état initial $|i\rangle$ est au repos. Pour aller plus loin, il est utile de faire des approximations qui simplifient les expressions sans affecter qualitativement la physique :

1. $W_{fi}$ est indépendant de $\vec{k}$ et $\vec{e}$, $W_{fi} = \mathcal{W}$ ;
2. $k \simeq k_0$ ;
3. $\tilde{\omega}_0 = \omega_0 - E_R$ ; ceci tient compte du recul de l'atome.

L'opérateur statistique de l'atome est obtenu en prenant la trace sur les variables du photon

$$\rho_{\mathrm{at}} = \mathrm{Tr}_{\mathcal{E}} |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)| = \sum_{\vec{k}',\vec{e}_s} \langle \vec{k}', \vec{e}_s\, |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)| \vec{k}', \vec{e}_s\rangle \tag{17.137}$$

$$= \sum_{\vec{k}} \frac{|\mathcal{W}|^2/\hbar^2}{(\omega - \tilde{\omega}_0)^2 + \Gamma^2/4} | -\hbar\vec{k}\rangle\langle -\hbar\vec{k}|$$

$$= \sum_{\vec{k}} |\gamma(k)|^2 \; | -\hbar\vec{k}\rangle\langle -\hbar\vec{k}| \tag{17.138}$$

On déduit de (17.138) les cohérences de $\rho_{\mathrm{at}}$

$$\langle \vec{r}\,|\rho_{\mathrm{at}}|\vec{r}\,'\rangle = \sum_{\vec{k}} |\gamma(k)|^2\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r} - \vec{r}\,')} \tag{17.139}$$

Compte tenu de l'intégrale angulaire

$$\int \mathrm{d}\Omega_k\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}_0\cdot(\vec{r} - \vec{r}\,')} = 4\pi \frac{\sin k_0 R}{k_0 R} \tag{17.140}$$

avec $R = |\vec{r} - \vec{r}\,'|$, nous obtenons le résultat final sous la forme

$$\langle \vec{r}\,|\rho_{\rm at}|\vec{r}\,'\rangle \sim \frac{\sin k_0 R}{k_0 R} \exp\left(-\frac{\Gamma R}{2c}\right) \tag{17.141}$$

La portée des cohérences $r_{\rm coh}$ est donc limitée par la longueur d'onde du photon émis, $r_{\rm coh} \lesssim \lambda_0 \sim 1/k_0$.

Supposons que l'atome soit initialement dans un état de superposition de deux paquets d'ondes de largeur $\sigma$ dont les centres sont distants de $a \gg \sigma$ : voir (12.129). Les cohérences sont détruites pour $a \gtrsim \lambda_0$. Ceci a été vérifié dans des expériences d'interférences avec des molécules lourdes genre fullérène ($C_{60}$ de poids moléculaire $\sim 10^3$) : figure 17.5. Ces molécules possèdent un nombre de degrés de liberté très élevé (200 niveaux de vibration) qui interagissent avec l'environnement. L'interfrange $i$ est donné par

$$i = \frac{\lambda_{\rm dB} D}{a_{\rm eff}} \qquad \lambda_{\rm dB} = \frac{h}{mv}$$

où $\lambda_{\rm dB}$ est la longueur d'onde de de Broglie, qui est très petite par rapport aux dimensions moléculaires, et $a_{\rm eff}$ la distance effective entre les fentes[20]. Les dimensions moléculaires sont en effet $\sim 1\,$nm, $\lambda_{\rm dB} = 0.0025\,$nm, alors que $a_{\rm eff} = 1\,\mu$m.

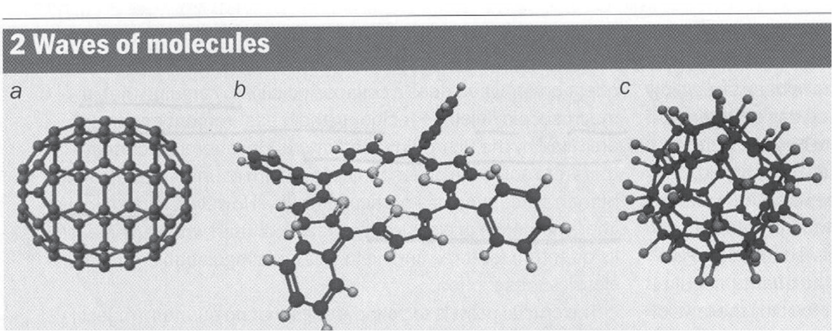



FIG. 17.5 – Molécules utilisées dans les expériences d'interférences : (a) $C_{70}$, (b) $C_{44}H_{30}N_4$, (c) $C_{60}F_{48}$. D'après Arndt *et. al.* [2005], reproduit avec l'aimable autorisation d'A. Zeilinger.

Deux phénomènes sont principalement à l'origine de la décohérence, qui se traduit par le brouillage des interférences (figure 17.6).

1. L'émission de photons par des états excités : la longueur d'onde $\lambda$ des photons émis sur le trajet de la molécule entre la source et le détecteur decroît quand la température $T$ des molécules croît, car on excite des

20. En effet, l'expérience n'utilise pas directement des fentes d'Young, mais un interféromètre de Talbot-Lau.

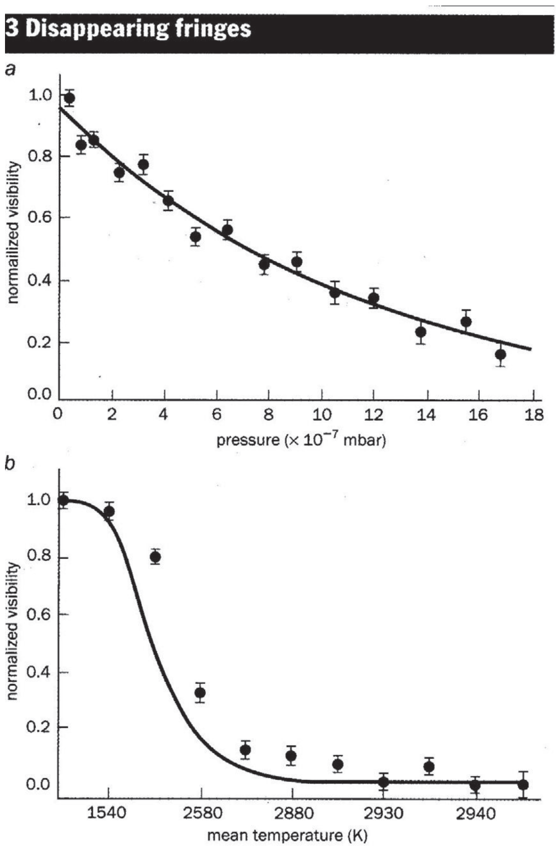



FIG. 17.6 – Brouillage des interférences en raison de la décohérence. Figure du haut : influence de la pression. Figure du bas : influence de la température. D'après Arndt *et. al.* [2005], reproduit avec l'aimable autorisation d'A. Zeilinger.

niveaux de plus en plus élevés. Trois photons sont émis en moyenne par molécule à 2500 K et conduisent au brouillage des interférences, parce que l'on dispose alors d'une information sur le chemin suivi. L'émission d'un photon tel que $\lambda \ll a$ permet en principe de déterminer la trajectoire, et l'information est codée dans l'environnement, même si on ne peut pas l'observer en pratique. Quantitativement, la fonction de décohérence $\eta(\vec{r}-\vec{r}\,')$ est donnée par

$$\begin{aligned}\rho(\vec{r}-\vec{r}\,') &= \eta(\vec{r}-\vec{r}\,')\rho_0(\vec{r}-\vec{r}\,')\\ \eta(\vec{r}-\vec{r}\,') &= \frac{1}{\mathcal{E}_{\rm tot}}\int_0^\infty {\rm d}\lambda\,\mathcal{E}_\lambda\,{\rm sinc}\left(2\pi\frac{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}{\lambda}\right)\end{aligned} \qquad (17.142)$$

avec $\mathrm{sinc}\, x = \sin x/x$ et $\mathcal{E}_\lambda$ est le taux d'émission à $\lambda$.

2. Les collisions avec le gaz résiduel, qui seront étudiées dans la section 18.3.

La frontière classique/quantique n'est pas fixée par la taille des objets, mais par le type d'interaction avec l'environnement. Une molécule lourde peut se comporter comme un objet quantique (interférences), ou comme un objet classique (pas d'interférences) selon son environnement. Les "gros" objets *apparaissent* classiques parce qu'il est d'autant plus difficile de les isoler de leur environnement qu'ils sont gros, et la décohérence est due à l'information codée dans l'environnement.

## 17.4 Corrélations de photons

### 17.4.1 Détection de photons et fonctions de corrélation

Nous avons vu que le concept de photon n'était pas indispensable pour rendre compte de l'effet photoélectrique habituel. On peut se demander s'il existe des situations où ce concept est nécessaire pour rendre compte en général de la détection du rayonnement électromagnétique. Avant de donner une réponse positive à cette question dans le § 17.4.2, nous allons d'abord examiner le mécanisme de détection du rayonnement électromagnétique. Réduit à sa plus simple expression, un photodétecteur consiste en un atome qui est ionisé par effet photoélectrique. Le signal est ensuite amplifié et se traduit en fin de compte par un clic du détecteur, mais nous ne nous attarderons pas sur le détail du mécanisme d'amplification. Nous allons écrire un modèle de l'effet photoélectrique, en nous donnant un hamiltonien $H$ composé d'un hamiltonien libre $H_0$, somme du hamiltonien atomique et de celui du champ électromagnétique quantifié (17.48), et de l'interaction $W$ que nous écrirons à l'approximation dipolaire comme le produit scalaire de l'opérateur moment dipolaire $\vec{D}$ de l'atome et du champ électrique quantifié $\vec{\mathsf{E}}$

$$W = -\vec{D} \cdot \vec{\mathsf{E}}(\vec{r}, t = 0) \tag{17.143}$$

où $\vec{r}$ est la position de l'atome : nous supposons que la longueur d'onde du photon est grande par rapport aux dimensions atomiques, de façon à pouvoir utiliser l'approximation dipolaire. Il est commode de se placer dans le point de vue de l'interaction, où le champ électrique $\vec{\mathsf{E}}(\vec{r}, t)$ est donné par (17.49), puisque dans notre cas les points de vue de l'interaction et de Heisenberg coïncident. Afin de simplifier les notations, nous allons considérer une seule direction de polarisation, ce qui nous permet de remplacer les opérateurs vectoriels $\vec{D}$ et $\vec{\mathsf{E}}$ par des scalaires $D$ et $\mathsf{E}$. Le champ électrique devient[21]

$$\mathsf{E}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \mathcal{E}_k \left[ a_{\vec{k}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} + a^\dagger_{\vec{k}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} \right] = \mathsf{E}^{(+)}(t) + \mathsf{E}^{(-)}(t) \tag{17.144}$$

21. La légère différence par rapport à (17.48) est absorbée dans une redéfinition de la phase des états atomiques.

avec $\mathcal{E}_k = \sqrt{\hbar\omega_k/2\varepsilon_0\mathcal{V}}$. Les termes $\mathsf{E}^{(+)}(t)$ et $\mathsf{E}^{(-)}(t)$, $([\mathsf{E}^{(+)}(t)]^\dagger = \mathsf{E}^{(-)}(t))$, proportionnels respectivement à $a_{\vec{k}} \exp(-\mathrm{i}\omega_k t)$ et à $a^\dagger_{\vec{k}} \exp(+\mathrm{i}\omega_k t)$, sont appelés composantes de *fréquence positive* et de *fréquence négative*[22] de $\mathsf{E}$. Nous appelons $|a\rangle$ et $|b\rangle$ les deux niveaux atomiques[23] d'énergie $E_a$ et $E_b$, où $|a\rangle$ est un état lié et $|b\rangle$ un état du continuum, $\omega_{ba} = (E_b - E_a)/\hbar$ et $\tilde{D}_{ba}(t)$ l'élément de matrice du dipôle donné dans le point de vue de l'interaction par

$$\tilde{D}_{ba}(t) = \langle b|\tilde{D}(t)|a\rangle = \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega_{ba}t}\, D_{ba} \tag{17.145}$$

Au premier ordre de la théorie des perturbations, le vecteur d'état atome+champ est donné par $(|\tilde{\Psi}(t=0)\rangle = |\Psi(t=0)\rangle)$

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = |\Psi(t=0)\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\, \tilde{W}(t')|\Psi(t=0)\rangle \tag{17.146}$$

Nous supposons que l'état de l'atome et celui du champ ne sont pas corrélés à $t = 0$

$$|\Psi(t=0)\rangle = |a \otimes \psi_i\rangle \tag{17.147}$$

où $|\psi_i\rangle$ est l'état du champ électromagnétique. Soit $|b \otimes \psi_f\rangle$, un état final possible, orthogonal à $|\Psi(t=0)\rangle$. Au premier ordre, l'amplitude de transition vers cet état est d'après (17.146)

$$\langle b \otimes \psi_f|\tilde{\Psi}(t)\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\, \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega_{ba}t'}\, D_{ba}\langle\psi_f|\mathsf{E}(\vec{r},t')|\psi_i\rangle \tag{17.148}$$

En utilisant le même raisonnement que dans le § 17.2.3, nous observons que l'approximation séculaire conduit à conserver uniquement la partie à fréquences positives de $\mathsf{E}$, ce qui permet de récrire (17.148)

$$\langle b \otimes \psi_f|\tilde{\Psi}(t)\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\, \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega_{ba}t'}\, D_{ba}\langle\psi_f|\mathsf{E}^{(+)}(\vec{r},t')|\psi_i\rangle \tag{17.149}$$

Le module carré de l'amplitude de transition (17.149) donne la probabilité pour que l'atome soit au temps $t$ dans l'état $|b\rangle$ et le champ dans l'état $|\psi_f\rangle$. Toutefois, nous observons uniquement l'état de l'atome, pas celui du champ, et il nous faut sommer sur tous les états finaux possibles du champ. Pour ce faire, nous nous concentrons pour l'instant sur la partie de l'amplitude de transition

22. Cette terminologie a l'origine suivante : un état d'énergie $E$ évolue comme $\exp(-\mathrm{i}Et/\hbar) = \exp(-\mathrm{i}\omega t)$. En fait, ce signe moins est une convention, mais il est choisi une fois pour toutes.

23. Nous utilisons $a$ et $b$ plutôt que $i$ et $f$, car cette notation sera réservée aux états du champ. La notation $(a, b)$ sera reconduite dans la section suivante.

(17.148) qui dépend du champ en calculant la quantité intermédiaire $X(t)$

$$\begin{aligned} X(t) &= \sum_f \int_0^t \mathrm{d}t' \, |\langle\psi_f|\mathsf{E}^{(+)}(\vec{r},t')|\psi_i\rangle|^2 \\ &= \sum_f \int_0^t \mathrm{d}t' \, \mathrm{d}t'' \, \langle\psi_i|\mathsf{E}^{(-)}(\vec{r},t'')|\psi_f\rangle\langle\psi_f|\mathsf{E}^{(+)}(\vec{r},t')|\psi_i\rangle \\ &= \int_0^t \mathrm{d}t' \, \mathrm{d}t'' \, \langle\psi_i|\mathsf{E}^{(-)}(\vec{r},t'') \, \mathsf{E}^{(+)}(\vec{r},t')|\psi_f\rangle \end{aligned} \tag{17.150}$$

où nous avons utilisé la relation de fermeture $\sum_f |\psi_f\rangle\langle\psi_f| = I$ dans l'espace des états du champ. L'état initial du champ n'est pas en général un état pur, mais un mélange décrit par un opérateur statistique $\rho$

$$\rho = \sum_i \mathsf{p}_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \tag{17.151}$$

et dans ces conditions

$$X(t) = \int_0^t \mathrm{d}t' \, \mathrm{d}t'' \, \mathrm{Tr} \left[\rho \, \mathsf{E}^{(-)}(\vec{r},t'') \, \mathsf{E}^{(+)}(\vec{r},t')\right] \tag{17.152}$$

Cette formule nous conduit à définir la *fonction de corrélation du premier ordre* $G^{(1)}$

$$\boxed{G^{(1)}(\vec{r},t'';\vec{r},t') := \mathrm{Tr} \left[\rho \, \mathsf{E}^{(-)}(\vec{r},t'') \, \mathsf{E}^{(+)}(\vec{r},t')\right] = \left\langle \mathsf{E}^{(-)}(\vec{r},t'')\mathsf{E}^{(+)}(\vec{r},t')\right\rangle} \tag{17.153}$$

La valeur moyenne dans (17.153) s'annule pour l'état du vide, $\rho = |0\rangle\langle 0|$, et plus généralement, elle ne contient aucune contribution des fluctuations de point zéro. L'équation (17.152) conclut le traitement de la partie de la probabilité de transition qui dépend du champ. Pour traiter la partie atome, nous définissons la transformée de Fourier $s(\omega)$ de la *sensibilité du détecteur* $s(t)$

$$s(\omega) = 2\pi \sum_b \xi_b |D_{ba}|^2 \delta(\omega - \omega_b) = \int \mathrm{d}t \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} s(t) \tag{17.154}$$

où $\xi_b$ est la probabilité que le photoélectron soit finalement enregistré par le détecteur après amplification. En portant (17.152) et (17.154) dans l'expression de la probabilité de transition $\mathsf{p}(t)$ nous obtenons

$$\boxed{\mathsf{p}(t) = \int_0^t \mathrm{d}t' \, \mathrm{d}t'' \, s(t' - t'') G^{(1)}(\vec{r},t'';\vec{r},t')} \tag{17.155}$$

Soit $\Delta\omega$ la largeur de bande du rayonnement incident : la détection n'est pas localisée dans le temps, elle dure un temps $\sim 1/\Delta\omega$. Si la sensibilité $s(\omega)$ est

indépendante de la fréquence, on a affaire à un “détecteur idéal”, pour lequel $s(t'-t'') = s_0\delta(t'-t'')$ ; on obtient alors une formule très simple pour le taux de détection par unité de temps $w(t)$,

$$w(t) = \frac{\mathrm{d}\mathsf{p}}{\mathrm{d}t} = s_0\big\langle \mathsf{E}^{(-)}(\vec{r},t)\,\mathsf{E}^{(+)}(\vec{r},t)\big\rangle \tag{17.156}$$

Cette expression est valable si le temps de corrélation du champ est très grand par rapport au temps de corrélation du détecteur : dans (17.156), on néglige les corrélations temporelles du champ, car $\mathsf{E}^{(-)}$ et $\mathsf{E}^{(+)}$ sont pris au même temps $t$.

L'expression (17.153) se généralise à la détection du rayonnement par $N$ atomes placés en $\vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_N$. Le taux de détection fait intervenir la valeur moyenne

$$\begin{aligned} G^{(N)}(x_1,\cdots,x_N;x'_N,\cdots,x'_1) &= \mathrm{Tr}\,\Big[\rho\,\mathsf{E}^{(-)}(x_1)\cdots\mathsf{E}^{(-)}(x_N)\mathsf{E}^{(+)}(x'_1)\cdots \\ &\qquad\times\,\mathsf{E}^{(+)}(x'_N)\Big] \\ &= \big\langle \mathsf{E}^{(-)}(x_1)\cdots\mathsf{E}^{(-)}(x_N)\mathsf{E}^{(+)}(x'_1)\cdots\mathsf{E}^{(+)}(x'_N)\big\rangle \end{aligned} \tag{17.157}$$

où nous avons utilisé la notation quadri-dimensionnelle $x=(\vec{r},t)$. Pour une complète généralité, nous avons choisi des arguments $x'_i \neq x_i$. Par exemple la généralisation de (17.153) serait

$$G^{(1)}(\vec{r}\,'',t'';\vec{r}\,',t') = \big\langle \mathsf{E}^{(-)}(\vec{r}\,'',t'')\mathsf{E}^{(+)}(\vec{r}\,',t')\big\rangle$$

### 17.4.2 Cohérences

Dans le produit de champs utilisé pour définir (17.157), tous les opérateurs de création sont à gauche de tous les opérateurs d'annihilation : un tel ordre est appelé *ordre normal*, et est noté : • :. Par exemple l'ordre normal : $\mathsf{E}^2$ : du produit $\mathsf{E}^2$ est obtenu en omettant un commutateur

$$:\mathsf{E}^2: = :\Big(\mathsf{E}^{(+)}+\mathsf{E}^{(-)}\Big)^2: = \Big(\mathsf{E}^{(+)}\Big)^2 + \Big(\mathsf{E}^{(-)}\Big)^2 + 2\mathsf{E}^{(-)}\,\mathsf{E}^{(+)} \tag{17.158}$$

Nous allons maintenant donner l'interpétation physique et quelques propriétés des fonctions de corrélation, ainsi que quelques applications des fonctions de corrélation d'ordre un et deux. La fonction $G^{(1)}(\vec{r},t;\vec{r},t)$ n'est autre que l'intensité lumineuse $\mathcal{I}(\vec{r},t)$ (à un facteur numérique près) au point $\vec{r}$ et au temps $t$

$$\mathcal{I}(\vec{r},t) = \big\langle \mathsf{E}^{(-)}(\vec{r},t)\,\mathsf{E}^{(+)}(\vec{r},t)\big\rangle = G^{(1)}(\vec{r},t;\vec{r},t) \tag{17.159}$$

En effet, si nous calculons la valeur moyenne de $\mathsf{E}^2$ (17.158), nous remarquons que $(\mathsf{E}^{(\pm)})^2$ se comporte en $\exp(\mp 2\mathrm{i}\omega t)$, et les valeurs moyennes temporelles de

ces deux termes sont nulles car le temps de réponse du détecteur est très long par rapport à la période du rayonnement : seule subsiste la valeur moyenne de $\mathsf{E}^{(-)}\,\mathsf{E}^{(+)}$ dans (17.158).

Il est facile de montrer l'inégalité

$$|G^{(1)}(x_1;x_2)|^2 \leq G^{(1)}(x_1;x_1)G^{(1)}(x_2;x_2) \tag{17.160}$$

Considérons, en effet, la quantité

$$A = \lambda_1 \mathsf{E}^{(+)}(x_1) + \lambda_2 \mathsf{E}^{(+)}(x_2)$$

On déduit immédiatement (17.160) de l'inégalité $\langle A^\dagger A\rangle \geq 0$. L'inégalité (17.160) se généralise aisément à des fonctions de corrélation d'ordre plus élevé.

Pour donner l'interpétation physique de $G^{(1)}(x_1;x_2)$, examinons une expérience d'interférences du type fentes d'Young. Le champ sur l'écran au point d'espace-temps $x = (\vec{r}, t)$ est la superposition des champs issus des fentes (1) et(2) aux temps $t_i$

$$t_i = t - \frac{|\vec{r} - \vec{r}_i|}{c} = t - \frac{s_i}{c} \qquad i = 1, 2$$

où $\vec{r}_i$ est la position de la fente $(i)$. Le champ $\mathsf{E}^{(+)}(\vec{r}, t)$ est donc

$$\mathsf{E}^{(+)}(\vec{r}, t) = K_1 \mathsf{E}^{(+)}(\vec{r}_1, t_1) + K_2 \mathsf{E}^{(+)}(\vec{r}_2, t_2) \tag{17.161}$$

où $K_1$ et $K_2$ sont des coefficients numériques, et l'intensité au point $\vec{r}$ est

$$\mathcal{I}(\vec{r}, t) = |K_1|^2 \mathcal{I}(\vec{r}_1, t_1) + |K_2|^2 \mathcal{I}(\vec{r}_2, t_2) + 2\mathrm{Re}\left[K_1 K_2^* G^{(1)}(x_1;x_2)\right] \tag{17.162}$$

Le dernier terme de (17.162) est manifestement un terme d'interférences, et il est contrôlé par la fonction de corrélation $G^{(1)}(x_1;x_2)$. Si l'on utilise pour $\mathsf{E}$ un développement en ondes planes, la contribution d'une onde plane à $G^{(1)}(x_1;x_2)$ est donnée par

$$G^{(1)}(x_1;x_2) = |\mathcal{E}_{\vec{k}}|^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_k(t_1 - t_2)} \left\langle a^\dagger_{\vec{k}}\, a_{\vec{k}} \right\rangle \tag{17.163}$$

La première exponentielle est indépendante de $\vec{r}$ et la seconde est à l'origine des interférences, si on la reporte dans (17.162). Dans le cas général, on voit d'après (17.162) que la visibilité des franges est contrôlée par la *cohérence d'ordre un* $g^{(1)}$

$$g^{(1)}(x_1;x_2) = \frac{G^{(1)}(x_1;x_2)}{\left[G^{(1)}(x_1;x_1)G^{(1)}(x_2;x_2)\right]^{1/2}} \tag{17.164}$$

qui vérifie d'après (17.160) l'inégalité $|g^{(1)}| \leq 1$. Une analyse plus complète de cette expérience d'interférences est proposée dans l'exercice 17.5.8.

Les expériences d'interférences qui mesurent les corrélations du premier ordre ne peuvent pas distinguer les différents états du champ, par exemple un état à un photon et un état cohérent. Ce sont uniquement les corrélations d'ordre supérieur ou égal à deux qui permettent de faire la différence. Nous nous contenterons de la corrélation d'ordre deux, définie suivant (17.157) par

$$G^{(2)}(x_1, x_2; x_2, x_1) = \left\langle \mathsf{E}^{(-)}(x_1)\, \mathsf{E}^{(-)}(x_2) \mathsf{E}^{(+)}(x_2)\, \mathsf{E}^{(+)}(x_1) \right\rangle \qquad (17.165)$$

où nous nous sommes limités au cas $x_i' = x_i$. Jusqu'à la fin de cette sous-section, nous allons ignorer les corrélations spatiales du champ et supprimer l'argument $\vec{r}$ afin d'alléger les notations. De plus, nous nous limitons à des situations stationnaires : par exemple l'intensité est indépendante du temps, $\mathcal{I}(t) = \mathcal{I}$. Écrivons donc la forme simplifiée de la corrélation d'ordre deux, avec $t_1 = t$, $t_2 = t - \tau$

$$G^{(2)}(t, t-\tau; t-\tau, t) = \left\langle \mathsf{E}^{(-)}(t)\, \mathsf{E}^{(-)}(t-\tau) \mathsf{E}^{(+)}(t-\tau)\, \mathsf{E}^{(+)}(t) \right\rangle \qquad (17.166)$$

qui ne dépend en fait que de $\tau$ en raison de la stationnarité, et définissons la *cohérence d'ordre deux* $g^{(2)}(\tau)$ par

$$G^{(2)}(t, t-\tau; t-\tau, t) = \mathcal{I}^2 \left(1 + g^{(2)}(\tau)\right) \qquad (17.167)$$

Dans le cas d'un *rayonnement classique*, $G^{(2)}(t, t-\tau; t-\tau, t)$ est une simple corrélation d'intensité

$$G^{(2)}(t, t-\tau; t-\tau, t) = \left\langle \mathcal{I}(t)\, \mathcal{I}(t-\tau) \right\rangle \qquad (17.168)$$

et on voit que $g^{(2)}(\tau)$ n'est pas limité comme l'était $g^{(1)}$

$$g^{(2)}(0) = \frac{\langle \mathcal{I}^2 \rangle}{\langle \mathcal{I} \rangle^2} - 1$$

ce qui montre que $0 \le g^{(2)}(0) < \infty$. *A contrario*, toute expérience mesurant une valeur $g^{(2)}(0) < 0$ mettrait en évidence le caractère quantique du rayonnement détecté. Un autre cas intéressant est celui du rayonnement gaussien : lorsqu'une distribution de probabilité est gaussienne, les moments d'ordre 4 s'expriment en fonction des moments d'ordre 2, et comme $\langle (\mathsf{E}^{(\pm)})^2 \rangle = 0$, on déduit

$$\begin{aligned} G^{(2)}(t, t-\tau; t-\tau, t) &= \left\langle \mathsf{E}^{(-)}(t)\, \mathsf{E}^{(+)}(t) \right\rangle \left\langle \mathsf{E}^{(-)}(t-\tau)\, \mathsf{E}^{(+)}(t-\tau) \right\rangle \\ &\quad + \left\langle \mathsf{E}^{(-)}(t)\, \mathsf{E}^{(+)}(t-\tau) \right\rangle \left\langle \mathsf{E}^{(-)}(t)\, \mathsf{E}^{(+)}(t-\tau) \right\rangle \\ &= \mathcal{I}^2 \left(1 + |g^{(1)}(\tau)|^2\right) \end{aligned}$$

La cohérence d'ordre deux s'exprime en fonction de la cohérence d'ordre un. Un autre cas extrême est celui d'un état à photon, car alors $G^{(2)} = 0$, soit

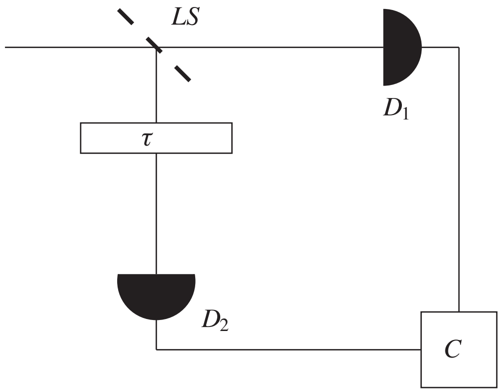



FIG. 17.7 – Mesure de la corrélation d'intensité. La lame séparatrice $LS$ est équilibrée et les détecteurs $D_1$ et $D_2$ sont à égale distance de $LS$. Un retard $\tau$ variable est introduit entre $LS$ et $D_2$, et le produit des intensités est effectué en $C$.

$g^{(2)} = -1$, ce qui est hautement non classique ! Enfin, pour un état cohérent, on a manifestement $g^{(2)} = 0$, car $a^2|z\rangle = z^2|z\rangle$.

Le schéma d'une expérience permettant de mesurer une cohérence temporelle d'ordre deux est dessiné sur la figure 17.7. Cette expérience a été réalisée pour la première fois par Hanbury Brown et Twiss[24] (HBT), et a donné comme résultat $g^{(2)}(0) = 1$. En fait, le rayonnement mesuré par HBT était un rayonnement thermique, et dans ce cas, il est facile de voir que

$$g^{(2)}(0) = \frac{\langle a^\dagger a^\dagger a a\rangle}{\langle a^\dagger a\rangle^2} - 1 = \frac{\langle n^2\rangle - \langle n\rangle}{\langle n\rangle^2} - 1 = 1$$

Lorsque $g^{(2)}(0) \geq 0$, on dit que l'on a affaire à un groupement de photons. Le dégroupement de photons[25], $g^{(2)}(0) < 0$ ne peut s'expliquer que par le caractère quantique du rayonnement. La quantité $g^{(2)}(0)$ reflète la distribution de probabilité du nombre de photons dans un mode : distribution de Bose-Einstein pour le rayonnement thermique ($g^{(2)}(0) = 1$), de Poisson pour un état cohérent ($g^{(2)}(0) = 0$), et plus étroite que Poisson pour un état non classique ($g^{(2)}(0) < 0$).

### 17.4.3 Expérience de Hanbury Brown et Twiss

L'expérience HBT destinée à mesurer le diamètre angulaire des étoiles est schématisée sur la figure 17.8 : deux sources $S_1$ et $S_2$ vues depuis l'origine sous un angle $2\theta$ émettent des photons détectés en $A$ et $B$ par deux détecteurs distants de $d$. On définit les distances $S_1A = S_2B = R_1$ et $S_1B = S_2A = R_2$.

24. Cette expérience était à l'origine destinée à mesurer le diamètre angulaire des étoiles.
25. En anglais : photon bunching et photon antibunching.

La corrélation d'intensité $\langle I(A)I(B)\rangle$ est déterminée en faisant le produit des signaux mesurés en $A$ et $B$. Commençons par un raisonnement classique : comme

$$R_2 - R_1 \simeq kd\theta \tag{17.169}$$

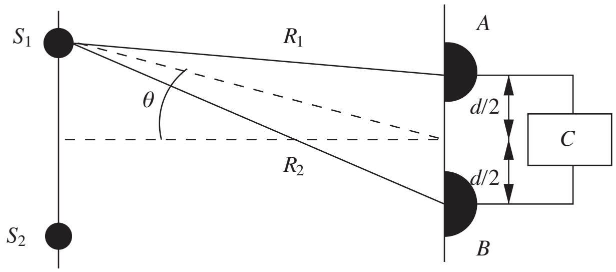



FIG. 17.8 – Schéma de l'expérience HBT destinée à mesurer le diamètre angulaire des étoiles.

où $\theta$ est défini sur la figure 17.7 et $k$ est le module du vecteur d'onde des photons, le champ électrique au point $B$, $E_B(1)$, dû à la source $S_1$ est relié à $E_A(1)$ par

$$E_B(1) = E_A(1)\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kd\theta} = E_A(1)\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta} \tag{17.170}$$

tandis que pour la source $S_2$

$$E_B(2) = E_A(2)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kd\theta} = E_A(2)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} \tag{17.171}$$

L'intensité moyenne en $A$ est

$$\langle I(A)\rangle = \left\langle |E_A(1) + E_A(2)|^2\right\rangle = \left\langle I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2}\,\cos\psi\right\rangle \tag{17.172}$$

où $\psi$ est le déphasage entre $E_A(1)$ et $E_A(2)$. Ce déphasage est aléatoire et $\langle\cos\psi\rangle = 0$ : en d'autres termes, il n'y a évidemment pas d'interférences du premier ordre si les sources $S_1$ et $S_2$ sont incohérentes. Il n'en est pas de même pour la corrélation d'intensité. Un calcul immédiat donne

$$\begin{aligned}\langle I(A)I(B)\rangle = \Big\langle &(I_1+I_2)^2 + 2(I_1+I_2)\sqrt{I_1 I_2}\,[\cos\psi + \cos(\psi - 2\delta)] \\ &+ 4I_1 I_2 \cos\psi\cos(\psi-2\delta)\Big\rangle = (I_1+I_2)^2 + 2I_1 I_2\cos 2\delta\end{aligned}$$

soit, si $I_1 = I_2 = I/2$

$$\langle I(A)I(B)\rangle = I^2\left[1 + \frac{1}{2}\cos 2\delta\right] \tag{17.173}$$

Prenons un modèle unidimensionnel où l'étoile est représentée par une source étalée entre $-\theta_0$ et $+\theta_0$ avec une intensité $1/2\theta_0$. On trouve en intégrant sur $\theta$

$$\langle I(A)I(B)\rangle = I^2\left[1 + \frac{\sin(2kd\theta_0)}{4kd\theta_0}\right] \tag{17.174}$$

Un pic de largeur $\Delta\theta_0 = 1/(2kd\theta_0)$ se superpose à un fond constant, et la largeur du pic, mesurée en faisant varier la distance $d$ entre les détecteurs, donne accès au diamètre angulaire de l'étoile.

Dans une description quantique, cette expérience mesure la cohérence d'ordre deux

$$g^{(2)}(\vec{r}_A, t, \vec{r}_B, t; \vec{r}_B, t, \vec{r}_A, t)$$

Afin de déterminer cette fonction, utilisons le raisonnement simplifié suivant : soit $a_i$, l'amplitude de probabilité pour que la source $S_i$ émette un photon. Les amplitudes de probabilité pour les quatre configurations possibles sont

$$\begin{aligned}
S_1A\,S_1B &: a_1^2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_1}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_2}\\
S_2A\,S_2B &: a_2^2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_1}\\
S_1A\,S_2B &: a_1a_2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_1}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_1}\\
S_1B\,S_2A &: a_2a_1\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_2}
\end{aligned}$$

Les chemins $\{S_1A\,S_2B\}$ et $\{S_1B\,S_2A\}$ sont indiscernables et les photons sont des bosons : on doit ajouter les *amplitudes*. La corrélation $\langle I(A)I(B)\rangle$ sera donc de la forme

$$\langle I(A)I(B)\rangle \propto |a_1^2|^2 + |a_2^2|^2 + |a_1a_2|^2(1+\cos\delta) \tag{17.175}$$

Si nous revenons à $g^{(2)}$ et au formalisme opératoriel

$$|a_i^2|^2 \to \langle a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i\rangle \qquad |a_ia_j|^2 \to \langle a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j\rangle$$

et si nous supposons que les intensités des deux sources sont identiques, nous obtenons pour la corrélation d'intensité

$$\langle I(A)I(B)\rangle \propto \langle n^2\rangle - \langle n\rangle + \langle n\rangle^2(1+\cos 2\delta) \tag{17.176}$$

Lorsque $S_1$ et $S_2$ sont des sources thermiques, $\langle n^2\rangle - \langle n\rangle = 2\langle n\rangle^2$, on retrouve $g^{(2)}(0) = 1$. Lorsque ce sont des lasers

$$\langle n^2\rangle - \langle n\rangle = \langle n\rangle^2 \iff g^{(2)}(0) = 0$$

Lorsque Hanbury Brown et Twiss ont proposé leur méthode, l'objection suivante leur avait été faite : comme les émissions de photons par $S_1$ et $S_2$ sont séparées par un intervalle du genre espace et ne peuvent pas être reliées de façon causale, comment peut-on espérer voir une corrélation ? En fait, le champ électrique juste avant les photodétecteurs est la superposition d'ondes émises par tous les atomes de l'étoile. Ce que mesurent les détecteurs, ce sont les propriétés statistiques du champ quantifié résultant de l'addition de toutes ces contributions. Les fluctuations du champ électromagnétique ont comme conséquence que les détections à deux instants ou en deux points voisins sont corrélées.

Une autre question intéressante est la suivante : l'effet HBT est-il relié à la statistique bosonique des photons ? La réponse est à la fois oui et non : la statistique *ne suffit pas* à expliquer la grande variété de $g^{(2)}(0)$ observés, mais l'effet *n'est pas non plus indépendant* de la statistique. Avec deux fermions, nous aurions un signe $(-)$ dans la combinaison des amplitudes $\{S_1A\, S_2B\}$ et $\{S_1B\, S_2A\}$ et

$$\langle I(A)I(B)\rangle \propto \langle n\rangle^2(1-\cos 2\delta)$$

ce que l'on voit aisément en remplaçant les RCC des $a_i$ et des $a_i^\dagger$ par des RAC (14.48) des $c_i$ et des $c_i^\dagger$. Cet effet a été observé expérimentalement par Kiesel *et al.* [2002] et Jeltes *et al.* [2007]. L'effet HBT appliqué aux mésons $\pi$ émis dans une collision d'ions lourds peut être utilisé pour mesurer la taille des "boules de feu" résultant de la collision (voir par exemple Baym [1998]).

# 17.5 Exercices

## 17.5.1 Potentiels scalaire et vecteur en jauge de Coulomb

On écrit formellement la relation (17.23) donnant le potentiel de Coulomb instantané

$$\overline{V} = -\frac{1}{\varepsilon_0}\,(\nabla^2)^{-1}\rho_{\rm em}$$

qui est la relation inverse de $\nabla^2\overline{V} = -\rho_{\rm em}/\varepsilon_0$. Utiliser la seconde équation de Maxwell (17.2) sous la forme

$$c^2\vec{\nabla}\times(\vec{\nabla}\times\vec{A}) = \frac{\partial}{\partial t}\left(-\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla}\overline{V}\right) + \frac{1}{\varepsilon_0}\,\vec{\jmath}_{\rm em}$$

pour montrer que $\vec{A}$ vérifie

$$\frac{1}{c^2}\,\frac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2} - \nabla^2\vec{A} = \mu_0\vec{\jmath}^{\,T}_{\rm em}$$

où le "courant électromagnétique transverse" $\vec{\jmath}^{\,T}_{\rm em}$ vaut

$$\vec{\jmath}^{\,T}_{\rm em} = \vec{\jmath}_{\rm em} - \vec{\nabla}\cdot[(\nabla^2)^{-1}(\vec{\nabla}\cdot\vec{\jmath}_{\rm em})]$$

## 17.5.2 Dépendance temporelle du coefficient de Fourier classique

On écrit la décomposition de Fourier du potentiel électromagnétique classique

$$A_{\rm cl}(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k}}\left(A_{\vec{k}}\,{\rm e}^{{\rm i}\vec{k}\cdot\vec{r}}{\rm e}^{-{\rm i}\omega_k t} + A'_{\vec{k}}\,{\rm e}^{-{\rm i}\vec{k}\cdot\vec{r}}{\rm e}^{\,{\rm i}\omega_k t}\right) + {\rm c.c.}$$

où l'on a omis la dépendance vectorielle qui ne joue aucun rôle dans l'argument ; c.c.= complexe conjugué. En utilisant

$$\sum_{\vec{k}} = \sum_{-\vec{k}} = \frac{1}{2}\left(\sum_{\vec{k}} + \sum_{-\vec{k}}\right)$$

montrer que l'on peut faire en sorte que $\exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r})$ soit toujours associé à $\exp(-\mathrm{i}\omega_k t)$, comme dans (17.33).

### 17.5.3 Relations de commutation du champ électromagnétique

**1.** En se plaçant à $t = 0$, évaluer le commutateur (17.51)

$$[\mathsf{A}_i(\vec{r}), -\varepsilon_0 \mathsf{E}_j(\vec{r}\,')] = \mathrm{i}\hbar \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\left(\delta_{ij} - \hat{k}_i\hat{k}_j\right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}$$

Montrer que ces relations sont aussi valables pour le commutateur *à temps égaux*

$$[\mathsf{A}_{\mathrm{H}i}(\vec{r}, t), -\varepsilon_0 \mathsf{E}_{\mathrm{H}j}(\vec{r}\,', t)]$$

**2.** En déduire les relations de commutation entre $\mathsf{E}_{\mathrm{H}i}$ et $\mathsf{B}_{\mathrm{H}j}$.

### 17.5.4 Détection homodyne et lame séparatrice déséquilibrée

**1.** On reprend l'interféromètre du § 1.4.5, en supposant qu'un seul photon dans le mode $a$ arrive dans l'interféromètre. Le mode $b$ est le vide, et l'état initial est donc $|1_a 0_b\rangle$. Montrer que l'état final est

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2}\left(-1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\right)|1_a 0_b\rangle + \frac{\mathrm{i}}{2}\left(1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\right)|0_a 1_b\rangle$$

En déduire les taux de comptage $S_a$ et $S_b$ des détecteurs $D_a$ et $D_b$ et retrouver les résultats du § 1.4.5

$$S_a \propto \langle\Psi|a^\dagger a|\Psi\rangle \qquad S_b \propto \langle\Psi|b^\dagger b|\Psi\rangle$$

Répéter le raisonnement pour un état de Fock initial à $n$ photons $|n_a 0_b\rangle$, et montrer que le résultat pour $n$ photons est le même que pour $n$ photons successifs. Que se passe-t-il si l'état initial est un état cohérent $|z_a 0_b\rangle$ ?

**2.** On utilise une détection homodyne avec un diviseur de faisceau déséquilibré, l'oscillateur local étant dans un état $|z\rangle$. Montrer que le taux de détection $S_a$ du détecteur $D_a$ est

$$S_a \propto \langle z|b^\dagger b|z\rangle \sin^2\lambda + \mathrm{Tr}\,(\rho_s a^\dagger a)\cos^2\lambda + \mathrm{i}\mathrm{Tr}\,\left[\rho_s|z\rangle\langle z|\left(a^\dagger b - ab^\dagger\right)\right]\sin\lambda\cos\lambda$$

où $\rho_s$ est l'opérateur statistique du signal. Donner l'interprétation physique des trois termes. Montrer que le dernier terme est un terme de battement entre le signal et l'oscillateur local et qu'il peut s'écrire

$$S_a^{\text{bat}} \propto 2\sqrt{t(1-t)}\,|z|\langle X_{[\theta+\pi/2]}\rangle$$

avec $z = |z|\exp(\mathrm{i}\theta)$.

### 17.5.5 Oscillations de Rabi dans une cavité

**1.** Dans le cadre du § 17.2.3 et de la figure 17.4, calculer la probabilité $\mathsf{p}(t)$ de trouver l'atome au temps $t$ dans l'état excité hors résonance, et montrer que la fréquence des oscillations est maintenant (toujours dans le cas où il n'y a pas de photons dans la cavité)

$$\Omega = \sqrt{\delta^2 + \Omega_R^2}$$

Montrer que pour un désaccord $\delta$ tel que $\Omega_R \ll |\delta| \ll \omega_0$, l'atome reste pratiquement toujours dans son état excité : l'émission spontanée est inhibée par la présence de la cavité. Comment doit-on modifier les résultats si la cavité contient exactement $n$ photons ?

**2.** On suppose que la cavité contient un état cohérent du champ $|z\rangle$ et on revient au cas de la résonance : $\delta = 0$. Montrer que la probabilité $\mathsf{p}(t)$ est

$$\mathsf{p}(t) = \frac{1}{2} - \frac{\mathrm{e}^{-|z|^2}}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{|z|^{2n}}{n!}\cos(\Omega_n t) \qquad \Omega_n = \Omega_R\sqrt{n+1}$$

Expérimentalement, la transformée de Fourier de $\mathsf{p}(t)$ exhibe des pics à des fréquences $\nu_0 = 47\,\text{kHz}$, $\nu_1 = 65\,\text{kHz}$ et $\nu_2 = 81\,\text{kHz}$. En déduire le nombre moyen de photons $n_0 = |z|^2$ de l'état cohérent sachant que le rapport de la hauteur des pics à $\nu_0$ et $\nu_1$ est $\simeq 0.9$.

**3.** Montrer que si $n_0 \gg 1$, alors il semble raisonnable de traiter $n$ comme une variable continue et $\mathsf{p}(t)$ se met sous la forme

$$\mathsf{p}(t) \simeq \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos(\Omega_{n_0}t)\,\mathrm{e}^{-t^2/\tau^2}$$

Donner l'expression du temps de relaxation $\tau$ des oscillations. En fait, il n'est pas correct de traiter $n$ comme une variable continue : l'étude numérique de la somme discrète montre que les oscillations commencent par disparaître pour $t \gtrsim \tau$, mais qu'elles réapparaissent au bout d'un certain temps. C'est le phénomène de résurgence. Estimer le temps $\tau_1$ au bout duquel les oscillations corrrespondant à $n_0 - \sqrt{n_0}$ et $n_0 + \sqrt{n_0}$ sont déphasées de $\pi$, et montrer que $\tau \simeq \tau_1$. Pourquoi les oscillations réapparaissent-elles après $2\tau_1$ pour redisparaître ensuite ?

### 17.5.6 Effet Casimir

En raison des fluctuations quantiques du champ électromagnétique, il existe une force attractive entre deux plaques conductrices parallèles distantes de $L$, même si ces deux plaques sont disposées dans le vide et sont électriquement neutres : c'est *l'effet Casimir*[26]. On suppose que les dimensions des plaques sont très grandes par rapport à $L$.

**1.** Par un argument dimensionnel, montrer que la force $P$ sur une plaque par unité de surface est de la forme

$$P = A\,\frac{\hbar c}{L^4}$$

où $A$ est un coefficient numérique. La surprise est que $A \neq 0$ !

**2.** Les deux plaques sont des rectangles parallèles au plan $xOy$ distants de $L$, de côtés $L_x$ et $L_y$, de surface $\mathcal{S} = L_x L_y$ avec $L_x, L_y \gg L$. On choisira des conditions périodiques suivant les axes $Ox$ et $Oy$ et on définira le vecteur d'onde $\vec{k}$ de $xOy$ par

$$\vec{k} = \left(\frac{2\pi n_x}{L_x}, \frac{2\pi n_y}{L_y}\right)$$

où $n_x$ et $n_y$ sont des entiers relatifs, $n_x, n_y \in \mathbb{Z}$. Montrer que si les plaques sont des conducteurs parfaits, les valeurs possibles des fréquences des ondes stationnaires sont de la forme

$$\omega_n(\vec{k}) = c\sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{L^2} + \vec{k}^{\,2}} \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

On rappelle que pour un conducteur parfait la composante transverse du champ électrique s'annule à la surface du métal[27]. Expliquer pourquoi pour $n = 0$, il n'existe qu'un seul mode de polarisation possible.

**3.** Montrer que l'énergie de point zéro (17.46) est

$$E_0(L) = \frac{\hbar}{2}\left(2\sum_{n,\vec{k}}{}' \omega_n(\vec{k})\right)$$

où

$$\sum_{n,\vec{k}}{}' = \frac{1}{2}\sum_{n=0,\vec{k}} + \sum_{n\geq 1,\vec{k}}$$

**4.** On doit tenir compte de ce que le conducteur n'est jamais parfait : l'approximation du conducteur parfait est excellente à basse fréquence, mais à haute fréquence, tout conducteur réel devient transparent. On doit donc modifier l'énergie de point zéro en tenant compte d'un facteur de coupure

26. Cet exercice est adapté d'une présentation de B. Duplantier, Séminaire H. Poincaré, mars 2002.

27. Voir par exemple Jackson [2001], section 8.1.

$\chi(\omega/\omega_c)$, $\chi(0) = 1$ et $\lim_{u\to\infty}\chi(u) = 0$ : $\chi(u)$ est une fonction régulière, décroissant de la valeur un à $u = 0$ à la valeur zéro pour $u \to \infty$. En déduire

$$\begin{aligned} E_0(L) &= \frac{\hbar\mathcal{S}}{(2\pi)^2}\sum_{n=0}^{\infty}{}' \int \mathrm{d}^2k\, \omega_n(\vec{k})\chi\left(\frac{\omega_n(\vec{k})}{\omega_c}\right) \\ &= \frac{\hbar\mathcal{S}}{2\pi c^2}\sum_{n=0}^{\infty}{}' \int_{\omega_n}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \omega^2\chi\left(\frac{\omega}{\omega_c}\right) \qquad \omega_n = \frac{\pi c n}{L} \end{aligned}$$

Grâce au facteur de coupure, cette énergie est finie.

**5.** Calculer la pression exercée sur la plaque de droite

$$P_{\mathrm{int}} = -\frac{1}{\mathcal{S}}\frac{\mathrm{d}E_0}{\mathrm{d}L} = -\frac{\pi^2\hbar c}{2L^4}\sum_n{}' g(n)$$

où

$$g(n) = n^3\chi\left(\frac{\omega_n}{\omega_c}\right)$$

Pour obtenir la pression totale sur cette plaque, il faut retrancher la pression en sens contraire exercée par le vide à l'extérieur de l'espace entre les deux plaques. Calculer l'énergie correspondante et en déduire la pression

$$P_{\mathrm{ext}} = -\frac{\pi^2\hbar c}{2L^4}\int_0^{\infty}\mathrm{d}n\, g(n)$$

La pression totale sur la plaque est $P_{\mathrm{tot}} = P_{\mathrm{int}} - P_{\mathrm{ext}}$. Utiliser la formule d'Euler-Mac Laurin

$$\sum_{n=0}^{\infty}{}' g(n) - \int_0^{\infty} g(n) = -\frac{1}{12}\, g'(0) + \frac{1}{6!}\, g'''(0) + \ldots$$

pour montrer que le résultat à la limite où le facteur de coupure devient égal à un est

$$P_{\mathrm{tot}} = -\frac{\pi^2}{240}\,\frac{\hbar c}{L^4}$$

Cette pression est attractive, et surtout elle est finie ! En tenant compte soigneusement de tous les effets physiques, nous avons déduit d'une quantité *a priori* infinie, l'énergie de point zéro, une *quantité finie et mesurable*[28].

## 17.5.7 Observation non destructive de photons

Le schéma de l'expérience illustré sur la figure 17.4 est semblable en partie à celui utilisé pour les horloges atomiques (§ 5.4.3). Toutefois, comme dans

28. Une référence récente est Mohiden et Roy [1998]. La précision des mesures de l'effet Casimir est actuellement de l'ordre de 1 %, et les mesures confirment la validité de la formule théorique.

le cas des oscillations de Rabi du vide (§ 17.2.3), on dispose sur le parcours des atomes de rubidium, entre les cavités $R_1$ et $R_2$, une cavité $C$ qui peut contenir des photons micro-ondes. La cavité est résonante pour une fréquence $\omega_0 = 51.1$ GHz et la vie moyenne d'un photon dans la cavité est de l'ordre de 0.1 s. Les atomes sont préparés dans des états de Rydberg : exercice 15.4.4.

**1.** Résultat préliminaire. On se propose de déterminer le déphasage accumulé par un atome dans l'état $|g\rangle$ ou $|e\rangle$ lorsque cet atome traverse la cavité $C$ et que cette cavité contient exactement $n$ photons. Représenter graphiquement les énergies $E_n^\pm$ des états propres (17.93) du hamiltonien de Jaynes-Cummings. On se place hors résonance, $|\delta| \gg \Omega_R$. Montrer que, dans ce cas, les énergies $E_n^\pm$ prennent la forme approchée

$$E_n^\pm \simeq \pm\frac{\hbar}{2}\delta \pm \hbar\frac{\Omega_n^2}{4\delta} = \pm\frac{\hbar}{2}\delta \pm \hbar(n+1)s_0$$

avec $\Omega_n = \Omega_R\sqrt{n+1}$ et $s_0 = \Omega_R^2/(4\delta)$. Si l'on compare maintenant les états atome+$n$ photons $|g \otimes n\rangle$ (et non $|g \otimes (n+1)\rangle$ !) et $|e \otimes n\rangle$, montrer que le déplacement d'énergie de ces deux états, dû à la présence de $n$ photons quand l'atome traverse la cavité est, pour les états $|g\rangle$ et $|e\rangle$

$$\Delta_{en} = -\hbar(n+1)s_0 \qquad \Delta_{gn} = \hbar n s_0$$

Montrer que hors résonance les vecteurs d'état $|g \otimes n\rangle$ et $|e \otimes n\rangle$, après le passage dans la cavité, sont déphasés de

$$\Phi(n) = 2\Big(n + \frac{1}{2}\Big)s_0 t$$

où $t$ est le temps de traversée de la cavité. En fait, le champ dans la cavité n'est pas uniforme, et $t$ représente une durée effective. Les termes $\propto n$ représentent le déplacement lumineux des niveaux d'énergie, proportionnel au nombre de photons, et les termes $\propto 1/2$, le déplacement Lamb. On peut montrer que hors résonance les niveaux d'énergie suivent une trajectoire adiabatique lors du passage dans la cavité : un atome entré dans le niveau $|g\rangle$ ($|e\rangle$) en sort dans le niveau $|g\rangle$ ($|e\rangle$). De plus, la probabilité d'émission ou d'absorption d'un photon par l'atome est négligeable.

**2.** On examine maintenant le passage de l'atome dans les cavités, $R_1$ et $R_2$ où règne un champ de radiofréquences résonant pour la fréquence $\omega_0 = (E_e - E_g)/\hbar$. Dans ces cavités, on prend comme hamiltonien d'interaction atome-champ de radiofréquences

$$H_1(t) = -\frac{1}{2}\hbar\omega_1\left[\sigma_x\cos(\omega t - \phi) - \sigma_y\sin(\omega t - \phi)\right]$$

On introduit donc un déphasage $\phi$ du champ de radiofréquences. Bien sûr, $\phi$ ne peut pas avoir de signification absolue (pourquoi ?), mais ce qui peut jouer

un rôle est le déphasage entre deux champs oscillants (question **5**). Montrer que ce hamiltonien s'écrit dans le référentiel tournant

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{2}\hbar\omega_1 \left[\sigma_x \cos\phi + \sigma_y \sin\phi\right]$$

Montrer qu'à la résonance l'opérateur d'évolution dans le référentiel tournant $\exp(-\mathrm{i}\hat{H}_1 t/\hbar)$ correspond à une rotation d'angle $-\omega_1 t$ autour d'un axe $\hat{n}$ du plan $xOy$

$$\hat{n} = (\cos\phi, \sin\phi, 0)$$

**3.** On considère le dispositif expérimental de la figure 17.4. Le système à deux niveaux a pour états de base les deux états atomiques $|g\rangle \equiv |+\rangle$ et $|e\rangle \equiv |-\rangle$, avec une différence d'énergie

$$E_e - E_g = E_- - E_+ = \hbar\omega_0$$

Les atomes sont produits par le four dans l'état $|+\rangle$. Les cavités $R_1$ et $R_2$ permettent d'effectuer des rotations de Rabi de $\pi/2$ grâce à un champ de radiofréquences résonant, $\omega = \omega_0$, interagissant avec l'atome. On fait le choix $\phi = 0$ pour la cavité $R_1$. Montrer qu'à la sortie de $R_1$, l'atome est dans l'état de superposition linéaire

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + \mathrm{i}|-\rangle)$$

**4.** La cavité $C$ contient soit zéro photon ($n = 0$), soit un photon ($n = 1$). Le passage de l'atome à travers la cavité induit un déphasage de l'état $|-\rangle$ calculé dans la question **1**

$$|-\rangle \to \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\Phi(n=1)}|-\rangle$$

On ajuste les paramètres de l'expérience ($\delta/2\pi = 67\,\mathrm{kHz}$, voir Gleyzes *et al.* [2007]) de telle sorte que

$$\Phi(n = 1) - \Phi(n = 0) = \pi$$

Montrer que si l'atome est détecté dans l'état $|-\rangle$ ($|+\rangle$) après passage dans $R_2$, cela veut dire qu'il y avait $n = 0$ ($n = 1$) photon dans la cavité. Le photon n'étant pas absorbé par l'atome, l'expérience permet donc de détecter la présence d'un photon sans le détruire.

**5.** L'état $|\chi\rangle$ du champ électromagnétique dans $C$ est maintenant une superposition linéaire d'états à $n$ photons $|n\rangle$, par exemple un état cohérent

$$|\chi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle \qquad \sum_n |c_n|^2 = 1$$

On ajuste les paramètre de l'expérience (voir Guerlin *et al.* [2007]) de sorte que le déphasage de l'état $|-\rangle$ soit maintenant

$$|-\rangle \to \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\pi n/q}|-\rangle$$

où $q$ est un nombre entier ($q = 1$ dans la question précédente). Donner sur la sphère de Poincaré-Bloch l'interprétation géométrique du vecteur d'état $|\psi(n)\rangle$ de l'atome qui serait obtenu après passage dans $C$ si celle-ci contenait *exactement* $n$ photons

$$|\psi(n)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + \mathrm{i}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi n/q}|-\rangle)$$

La cavité $R_2$ est maintenant déphasée de $\phi$ par rapport à $R_1$ (voir la question **2**). Quelle est la probabilité de détecter l'atome dans l'état $|\pm\rangle$ après le passage dans $R_2$ ?

**6.** Il sera commode de récrire les résultats de la question **5** en utilisant la notation $|+\rangle \to |0\rangle$, $|-\rangle \to |1\rangle$, soit $|\pm\rangle \to |j\rangle$, avec $j = 0$ ou $j = 1$. Montrer que l'amplitude de probabilité $a(j,\phi)$ pour détecter l'atome dans l'état $j$ sous la condition que la cavité contienne exactement $n$ photons peut se mettre sous la forme

$$a(j,\phi) = \langle j,\phi|\psi(n)\rangle$$

avec

$$|j,\phi\rangle = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}\pi}{4}[\sigma_x\,\cos\phi + \sigma_y\,\sin\phi]\right)$$

On note $\mathsf{p}(j,\phi|n)$ la probabilité conditionnelle de détecter l'atome dans l'état $j = 0\,(|+\rangle)$ ou dans l'état $j = 1\,(|-\rangle)$, sous la condition que la cavité contienne $n$ photons. Montrer que les résultats de la question **5** peuvent s'écrire

$$\mathsf{p}(j,\phi|n) = \frac{1}{2}\left[1 - \cos\left(\frac{\pi n}{q} - \phi + j\pi\right)\right]$$

Le vecteur d'état du champ étant $|\chi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$, la probabilité d'observer $n$ photons est donnée par $\mathsf{p}_0(n) = |c_n|^2$. Montrer que la probabilité de trouver $n$ photons conditionnée par la détection de la valeur $j$ et la donnée de $\phi$ vaut

$$\mathsf{p}(n|j,\phi) = \frac{\mathsf{p}_0(n)\mathsf{p}(j,\phi|n)}{\mathsf{p}(j,\phi)} \qquad \mathsf{p}(j,\phi) = \sum_n \mathsf{p}(j,\phi|n)\mathsf{p}_0(n)$$

**7.** Après le passage dans $C$, mais avant le passage dans $R_2$ et la détection de l'atome, le système atome+champ est dans l'état intriqué

$$\sum_n c_n|\psi(n)\rangle \otimes |n\rangle$$

Montrer qu'après détection de l'atome dans l'état $|j,\phi\rangle$, le vecteur d'état atome+champ devient

$$\frac{1}{\sqrt{\mathsf{p}(j,\phi)}}\left[\sum_n c_n\langle j,\phi|\psi(n)\rangle|n\rangle\right] \otimes |j,\phi\rangle$$

Suggestion : voir l'exercice 4.4.9. Comment la distribution de probabilité des photons est-elle modifiée par la mesure de l'état de l'atome ?

### 17.5.8 Cohérences et interférences

Nous allons analyser l'expérience des trous d'Young en supposant que les fentes sont suffisamment étroites pour que nous puissions négliger la largeur finie des pics de diffraction : chaque trou émet une onde sphérique. Soit $a$, l'opérateur d'annihilation correspondant au mode incident. Les trous d'Young se comportent comme une lame séparatrice et on peut écrire (*cf.* § 17.2.2)

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 + a_2)$$

où $a_i$ est l'opérateur d'annihilation correspondant au mode radial du champ émis par le trou $i$. Nous avons pour le champ au point $\vec{r}$

$$\mathsf{E}^{(+)}(\vec{r}, t) = f(r)\left[a_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}ks_1} + a_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}ks_2}\right] \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \qquad s_i = \frac{|\vec{r} - \vec{r}_i|}{c}$$

Comme dans le cas de la lame semi-transparente, la cohérence du formalisme impose d'introduire un mode $b$

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 - a_2)$$

bien que ce mode reste constamment dans l'état du vide.

**1.** On suppose que le mode $a$ contient un seul photon : l'état initial est donc $|1_a 0_b\rangle$. Montrer que

$$|1_a 0_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |01\rangle)$$

où $|10\rangle$ correspond à 1 photon (resp. 0 photon) dans le mode $a_1$ (resp. $a_2$) et $|01\rangle$ à 1 photon (resp. 0 photon) dans le mode $a_2$ (resp. $a_1$). Montrer que l'intensité est

$$I \propto \frac{1}{2}\langle 10|a_1^\dagger a_1|10\rangle + \frac{1}{2}\langle 01|a_2^\dagger a_2|01\rangle + \langle 10|a_1^\dagger a_2|01\rangle \cos\Phi$$

avec $\Phi = k(s_1 - s_2) + \text{cste}$.

**2.** Généraliser ce résultat à un état initial à $n$ photons $|n_a 0_b\rangle$ et à un état cohérent $|z_a 0_b\rangle$.

**3.** Supposons que les modes $a_1$ et $a_2$ sont indépendants et sont engendrés par deux lasers différents. Peut-on observer des interférences ?

### 17.5.9 Forces réactives

**1.** On reprend le hamiltonien de Jaynes-Cummings du § 17.2.3 pour un atome à deux niveaux $|g\rangle$ et $|e\rangle$ plongé dans le champ électrique quantifié d'une cavité

$$\mathsf{E} = \mathcal{E}(a + a^\dagger)\sin kz \qquad \mathcal{E} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}}$$

La fréquence $\Omega_1$ définie par

$$\Omega_1(z) = 2\,\frac{d\mathcal{E}}{\hbar}\,\sin kz$$

est une fonction de $z$. Si l'on se restreint au sous-espace $\mathcal{H}^{(n)}$ sous tendu par les vecteurs $|\varphi_n^g\rangle$ et $|\varphi_n^e\rangle$ (17.78), les vecteurs propres sont donnés par (17.93)

$$\begin{aligned}|\chi_{1n}(z)\rangle &= -\sin\theta_n(z)|g\otimes(n+1)\rangle + \cos\theta_n(z)|e\otimes n\rangle\\ |\chi_{2n}(z)\rangle &= \cos\theta_n(z)|g\otimes(n+1)\rangle + \sin\theta_n(z)|e\otimes n\rangle\end{aligned}$$

Calculer la force sur un atome au repos en $z$ lorsque cet atome est dans l'état $|\chi_{1n}\rangle$ ou dans l'état $|\chi_{2n}\rangle$.

**2.** On supposera par la suite que le champ dans la cavité est celui d'un laser dans un état cohérent, avec un nombre moyen de photons $\langle n\rangle \gg 1$, de telle sorte que $\Delta n \ll \langle n\rangle$. On peut alors écrire une expression classique de ce champ

$$E_L(t,z) = \mathcal{E}_0\cos\omega t\sin kz$$

En utilisant (17.56), montrer que

$$\hbar\Omega_1(z)\sqrt{\langle n\rangle} = \hbar\omega_1(z) \qquad\qquad \omega_1(z) = \frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar}\,\sin kz$$

où $\omega_1(z)$ est la fréquence de Rabi usuelle (*cf.* par exemple (15.36)). Dans la discussion précédente, on n'a pas pris en compte l'émission spontanée, qui a pour effet de dépeupler le mode laser au profit du mode du vide. Les taux de transition entre les états à $n+1$ et à $n$ photons sont donnés par

$$\Gamma_{ij}(z) = \Gamma|\langle\chi_{i,n}(z)|b + b^\dagger|\chi_{j,n+1}(z)\rangle|^2$$

avec $(i,j) = 1,2$. Calculer $\Gamma_{ij}(z)$ en fonction des angles $\theta_{n+1}(z)$ et $\theta_n(z)$. On supposera dans toute la suite de l'exercice que le laser est intense, $n \gg 1$ et $\Omega_{1n} \simeq \Omega_{1\langle n\rangle}(z) = \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2(z)}$.

**3.** On définit les populations $\mathsf{p}_i(z)$ de la manière suivante

$$\mathsf{p}_i(z) = \sum_n \langle\chi_{in}(z)|\rho|\chi_{in}(z)\rangle$$

où $\rho$ est l'opérateur statistique de l'atome habillé par le champ. En déduire que si $\Omega_{1\langle n\rangle} \gg \Gamma$, les populations obéissent aux équations pilotes

$$\begin{aligned}\dot{\mathsf{p}}_1(z) &= -\Gamma_{21}(z)\mathsf{p}_1(z) + \Gamma_{12}(z)\mathsf{p}_2(z)\\ \dot{\mathsf{p}}_2(z) &= \Gamma_{21}(z)\mathsf{p}_1(z) - \Gamma_{12}(z)\mathsf{p}_2(z)\end{aligned}$$

Quelles sont les valeurs stationnaires des populations $\mathsf{p}_i^{\rm st}$ en fonction de $z$ ? Montrer qu'un atome au repos subit une force

$$F(z) = \frac{1}{4}\,\hbar\,\frac{\partial\omega_1^2(z)}{\partial z}\,\frac{1}{\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2(z)}}\,\left(\mathsf{p}_1^{\rm st}(z) - \mathsf{p}_2^{\rm st}(z)\right)$$

Reporter dans ce résultat les valeurs de $\mathsf{p}_1^{\rm st}$ et $\mathsf{p}_2^{\rm st}$ et comparer à (15.60).

### 17.5.10 Capture radiative de neutrons par l'hydrogène

**NB.** Il est utile de relire les § 13.2.3 et 13.2.4. Dans un réacteur nucléaire à eau bouillante ou à eau pressurisée, une fraction des neutrons est absorbée par l'hydrogène de l'eau suivant la réaction

$$n + p \to \mathrm{D} + \gamma$$

$n$ = neutron, $p$ = proton, D = deutéron, $\gamma$ = photon. Cette réaction, dite de capture radiative, a l'inconvénient de diminuer le nombre des neutrons disponibles pour la fission. Le deutéron est un état lié neutron-proton, de moment angulaire total $J = 1$ et dont l'énergie de liaison est $B = 2.23\,\mathrm{MeV}$. Le deutéron est un mélange d'états ${}^3S_1$ et ${}^3D_1$, mais on tiendra compte pour simplifier uniquement de l'état ${}^3S_1$. Le but du problème est de calculer la section efficace de capture radiative. Dans les applications numériques, il sera commode d'utiliser un système d'unités où $\hbar = c = 1$. Dans ce système, masse, impulsion et énergie ont les dimensions de l'inverse d'une longueur, et le facteur de conversion est

$$1\,(\mathrm{fm})^{-1} \simeq 200\,\mathrm{MeV}$$

**1.** Les neutrons dans un réacteur sont de très basse énergie ($\ll 1\,\mathrm{MeV}$), et on peut alors représenter à une bonne approximation le potentiel $n$-$p$ dans l'onde $S$ par une fonction $\delta(\vec{r})$ [voir (13.44)]. La fonction d'onde de l'état lié est donnée par (13.45), avec $a \to a_t \simeq 5.40\,\mathrm{fm}$. Calculer la constante de normalisation $C$ et $\kappa^{-1}$ en fm. *On notera que $\kappa^{-1}$ fixe l'échelle de longueur du problème.*

Les états de diffusion qui vont nous intéresser sont les états ${}^1S_0$, où la longueur de diffusion est $a_s$, $a_s \simeq -23.7\,\mathrm{fm}$. Il est commode de fixer la normalisation en écrivant

$$\psi(r) = \frac{\sin[pr + \delta(p)]}{pr}$$

En déduire que pour $p \to 0$

$$\psi(r) \simeq -\frac{a}{r}\left(1 - \frac{r}{a}\right) \qquad a = a_t \;\text{ ou }\; a = a_s$$

**2.** Le neutron de la réaction de capture est très lent, et en raison de l'effet de barrière centrifuge, la réaction se fait dans une onde $S$, ce qui donne *a priori* deux possibilités

$$(n - p:\ {}^3S_1) \to D({}^3S_1) + \gamma \qquad (n - p:\ {}^1S_0) \to D({}^3S_1) + \gamma$$

Les transitions dipolaires électriques sont négligeables car elles correspondraient à un état initial dans une onde $P$ (pourquoi ?). La réaction provient du couplage $\vec{\mu} \cdot \vec{\mathsf{B}}$ entre le moment magnétique du deutéron $\vec{\mu}$ et le champ

magnétique quantifié $\vec{\mathsf{B}}$, avec

$$\begin{aligned}\vec{\mu} &= \frac{1}{2}\,\mu_N\,(\gamma_p\vec{\sigma}_p + \gamma_n\vec{\sigma}_n) \\ &= \frac{1}{4}\,\mu_N\,[(\gamma_p+\gamma_n)(\vec{\sigma}_p+\vec{\sigma}_n) + (\gamma_p-\gamma_n)(\vec{\sigma}_p-\vec{\sigma}_n)] \qquad (17.177)\end{aligned}$$

où $\mu_N = q_p\hbar/(2M)$ ; $\gamma_p \simeq 5.59$ et $\gamma_n \simeq -3.83$ sont liés aux facteurs gyromagnétiques du proton et du neutron et $\vec{\sigma}$ sont les matrices de Pauli. Montrer que le couplage avec le champ électromagnétique quantifié responsable de la réaction est

$$W' = -\frac{\mathrm{i}}{c}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}}\;\vec{\mu}\cdot[\hat{k}\times\vec{e}^{\,*}_\lambda(\vec{k})]a^\dagger_{\vec{k}\lambda}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

où le photon a un vecteur d'onde $\vec{k}$, une fréquence $\omega = ck$, $\hat{k} = \vec{k}/k$, $\vec{e}_\lambda$ est un vecteur de polarisation unitaire que l'on pourra prendre réel et $\mathcal{V}$ est le volume de normalisation. En négligeant le recul du deutéron et en remarquant que l'énergie des neutrons incidents $\varepsilon \ll B$, calculer $k$ en fm$^{-1}$ et en déduire que l'on peut faire l'approximation $\exp(-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}) \simeq 1$.

**3.** Justifier les différents facteurs dans l'expression ci-dessous de la section efficace, où $\Omega$ repère la direction d'émission $\vec{k}$ du photon et $\mathcal{F}$ est le flux de neutrons incidents

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar\mathcal{F}}\,|\langle f|W|i\rangle|^2\delta(\hbar\omega - (E_i - E_f))\frac{\mathcal{V}\omega^2\mathrm{d}\omega}{(2\pi)^3c^3}$$

avec

$$W = -\frac{\mathrm{i}}{c}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}}\;\vec{\mu}\cdot\vec{e}^{\,'}_\lambda(\vec{k}) \qquad\qquad \vec{e}^{\,'}_\lambda(\vec{k}) = \hat{k}\times\vec{e}_\lambda$$

$|i\rangle$ = état $n$-$p$ initial, $|f\rangle$ = état du deutéron.

**4.** L'élément de matrice $\langle f|W|i\rangle$ se décompose en une partie de spin et une partie spatiale, car le vecteur d'état total $\Psi_{i,f}$ est le produit d'un vecteur d'état de spin $\chi_{i,f}$ par une fonction d'onde spatiale $\psi_{i,f}(\vec{r})$

$$\Psi_{i,f} = \psi_{i,f}(\vec{r})\,\chi_{i,f}$$

(a) Si $\chi_t^m$, $m = \pm 1, 0$ et $\chi_s$ désignent les états triplet et singulet de spin, la partie spin de $\langle f|W|i\rangle$ sera

$$W_{\text{spin}} = \frac{1}{4}\,\mu_N\langle\chi_f|(\gamma_p+\gamma_n)(\vec{\sigma}_p+\vec{\sigma}_n)\cdot\vec{e}^{\,'}_\lambda + (\gamma_p-\gamma_n)(\vec{\sigma}_p-\vec{\sigma}_n)\cdot\vec{e}^{\,'}_\lambda|\chi_i\rangle$$

où $\chi_f = \chi_t^m$ et $\chi_i = \chi_t^m$ ou $\chi_s$. Montrer que

$$(\vec{\sigma}_p+\vec{\sigma}_n)|\chi_s\rangle = 0 \qquad\qquad \langle\chi_s|\vec{\sigma}_p|\chi_s\rangle = 0$$

(b) La partie spatiale fait intervenir l'intégrale

$$I_{fi} = \int \mathrm{d}^3r\,\psi_f^*(\vec{r})\psi_i(\vec{r}) = \int \mathrm{d}^3r\,\psi_D^*(\vec{r})\psi_i(\vec{r})$$

Montrer sans calcul que $I_{fi} = 0$ si $\psi_i$ et $\psi_f$ sont des fonctions d'onde $L = 0$ de l'état triplet. Calculer explicitement $I_{fi}$ si $\psi_i$ est une fonction d'onde singulet en utilisant les approximations de la question **1**.

**5.** Les résultats précédents peuvent être résumés comme suit

$$\begin{aligned} W_{\text{spin}} &= \frac{1}{4}\,\mu_N(\gamma_p - \gamma_n)\langle\chi_t^m|(\vec{\sigma}_p - \vec{\sigma}_n)\cdot\vec{e}_\lambda{}'|\chi_s\rangle \\ &\Longrightarrow \frac{1}{2}\mu_N(\gamma_p - \gamma_n)\langle\chi_t^m|\vec{\sigma}_p\cdot\vec{e}_\lambda{}'|\chi_s\rangle = \frac{1}{2}\mu_N(\gamma_p - \gamma_n)W'_{\text{spin}} \end{aligned}$$

Il faut élever au carré, sommer sur les polarisations du photon final ($\sum_\lambda$), sur les spins finaux du deutéron ($\sum_m$) et prendre la moyenne sur les spins initiaux (facteur 1/4). Montrer que

$$\begin{aligned} \langle|W'_{\text{spin}}|^2\rangle &= \frac{1}{4}\sum_m\sum_\lambda|\langle\chi_t^m|\vec{\sigma}_p\cdot\vec{e}_\lambda{}'|\chi_s\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4}\sum_{i,j}(\delta_{ij} - \hat{k}_i\hat{k}_j)\langle\chi_s|\sigma_{pi}\sigma_{pj}|\chi_s\rangle \end{aligned}$$

Suggestion : montrer que $\sum_m |\chi_t^m\rangle\langle\chi_t^m|$ peut être remplacé par l'opérateur identité dans l'espace des spins. En déduire $\langle|W'_{\text{spin}}|^2\rangle = 1/2$.

**6.** En rassemblant tous les facteurs, montrer que

$$\frac{1}{4}\sum_{\text{spins}}\sum_\lambda|\langle f|W|i\rangle|^2 = \frac{\hbar}{16\varepsilon_0\mathcal{V}}\,\frac{\omega}{c^2}\,\mu_N^2(\gamma_p - \gamma_n)^2 I_{fi}^2$$

Compte tenu de la normalisation des fonctions d'onde spatiales, on peut montrer que le facteur de flux $\mathcal{F} = \sqrt{2\varepsilon/M}$. En déduire la section efficace totale de la réaction de capture ($\alpha = q_p^2/(4\pi\varepsilon_0\hbar c)$)

$$\sigma_{\text{tot}} = \int \mathrm{d}\Omega\,\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\alpha\pi\hbar^2}{2c^4}\,\frac{B^{3/2}}{\sqrt{2\varepsilon}}\,\frac{1}{M^3}\,(\gamma_p - \gamma_n)^2(1 - \kappa a_s)^2$$

Comparer avec le résultat expérimental pour des neutrons thermiques à 300 K

$$\sigma_{\text{tot}} = 0.329 \pm 0.006 \times 10^{-28}\,\text{m}^2 = 32.9 \pm 0.6\,\text{fm}^2$$

### 17.5.11 L'expérience de Badurek *et al.*

L'expérience de Badurek *et al.* [1985][29] montre qu'un champ classique ne s'intrique pas avec le système quantique avec lequel il interagit. Le schéma de l'expérience est donné sur la figure 17.9 : il s'agit d'un interféromètre à neutrons où arrivent des neutrons polarisés spin up. Chaque bras de l'interféromètre contient une cavité où règnent un champ magnétique constant $\vec{B}_0$

29. Voir par exemple Omnès [1994], chapitre 11.

parallèle à $Oz$ et un champ de radiofréquences $\vec{B}_1(t)$ polarisé suivant $Ox$ de fréquence $\omega \simeq \omega_0$, où $\omega_0$ est la fréquence de Larmor dans $\vec{B}_0$, qui fait basculer les spins. Si le champ classique $\vec{B}_1(t)$ s'intriquait avec le spin, une trace du passage du neutron dans le bras supérieur (1) ou inférieur (2) de l'interféromètre serait laissée dans l'environnement, et les interférences seraient détruites. L'expérience montre que les interférences persistent, et donc qu'un champ classique ne s'intrique pas avec le système quantique avec lequel il interagit.

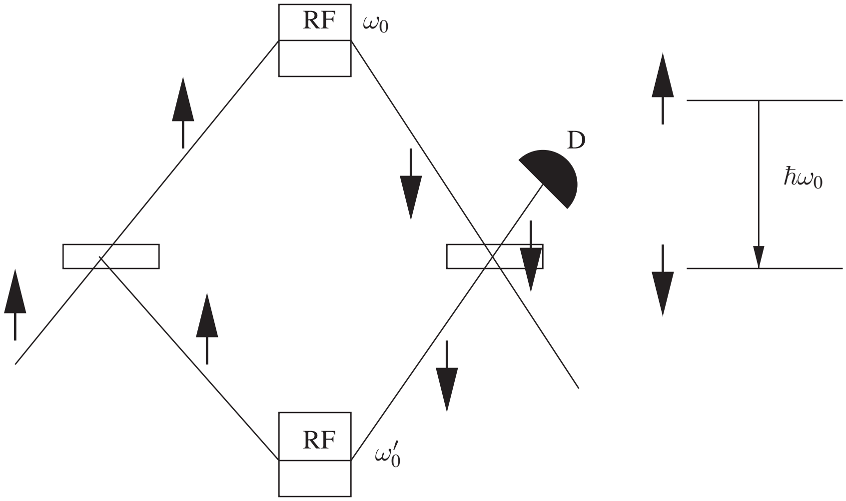



FIG. 17.9 – Schéma de l'expérience de Badurek *et al.* Les deux faisceaux sont recombinés par la lame horizontale de droite et les neutrons sont détectés en D.

**1.** Pour une étude quantitative, on écrit le vecteur d'état initial

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_1 + |\uparrow\rangle_2\right) \otimes |z(t=0)\rangle$$

où $|\uparrow\rangle_i$ représente un spin up incident dans le bras (i) de l'interféromètre et $|z(t=0)\rangle$ l'état cohérent du champ engendré par la source de radiofréquences à l'entrée de la cavité. Le champ magnétique quantifié $\vec{\mathsf{B}}$ est dans le point de vue de Schrödinger ($\alpha$ est une constante)

$$\vec{\mathsf{B}}_1 = \alpha \left(a + a^\dagger\right) \hat{x}$$

L'état cohérent du champ est supposé de la forme

$$|z(t)\rangle = |\,|z|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t - \phi)}\rangle$$

Montrer que la valeur moyenne du champ est

$$\langle \vec{\mathsf{B}}_1 \rangle(t) = 2\alpha |z| \cos(\omega t - \phi)\, \hat{x}$$

et en déduire $2\alpha|z| = B_1$.

**2.** On se place dans le point de vue de l'interaction, avec pour hamiltonien $H_0$

$$H_0 = \hbar\omega a^\dagger a - \frac{1}{2}\,\hbar\omega_0\sigma_z$$

Montrer qu'à l'approximation séculaire le hamiltonien d'interaction $W$ s'écrit dans le point de vue de l'interaction

$$\tilde{W} = -\frac{1}{2}\alpha\gamma\hbar\left[\sigma_+\, a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta t} + \sigma_-\, a^\dagger\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta t}\right]$$

où $\gamma$ est le facteur gyromagnétique du neutron et $\delta = \omega - \omega_0$ est le désaccord.

**2.** On définit le vecteur $|\varepsilon\rangle$ par

$$a^\dagger|z\rangle = z^*|z\rangle + |\varepsilon\rangle$$

Montrer que $\langle z|\varepsilon\rangle = 0$ et que $\|\varepsilon\|^2 = \langle\varepsilon|\varepsilon\rangle = 1$ : ajouter un photon à un état cohérent le modifie de façon négligeable si $|z| \gg 1$. En déduire que $\tilde{W}$ appliqué sur un état cohérent peut s'écrire sous la forme

$$\tilde{W} \simeq -\frac{1}{2}\hbar\omega_1\left[\sigma_+\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta t} + \sigma_-\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta t}\right]|z\rangle\langle z| - \frac{1}{2}\frac{\hbar\omega_1}{|z|}\,\sigma_-\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta t}|\varepsilon\rangle\langle z|$$

où $\omega_1 = \gamma B_1$ est la fréquence de Rabi. Le premier terme de $\tilde{W}$ est le hamiltonien d'interaction avec un champ classique, le deuxième terme est négligeable si $|z| \gg 1$, ce qui est le cas pour un champ classique. L'interaction avec le champ classique maintient la cohérence entre les états de spin $|\uparrow\rangle_1$ et $|\uparrow\rangle_2$, et les interférences ne sont pas détruites.

## 17.6 Bibliographie

Pour des compléments sur la quantification du champ électromagnétique, on pourra se reporter à Itzykson et Zuber [1980], chapitre 3, Le Bellac [1988], chapitre 9, Grynberg *et al.* [2010], chapitre 4, Gerry et Knight [2005], chapitre 2 ou Weinberg [1995], chapitre 8. Les fluctuations du champ électromagnétique et les états comprimés sont traitées par Grynberg *et al.* [2010] chapitre V et complément V.1, par Gerry et Knight [2005], chapitres 4, 6 et 7, ou par Mandel et Wolf [1995], chapitres 10, 11 et 12. L'électrodynamique en cavité et la détection homodyne sont traitées en détail par Gerry et Knight [2005], chapitres 6 et 10 et par Haroche et Raimond [2006], chapitre 3. La décohérence par émission de photons est traitée par Cohen-Tannnoudji [1989]. Pour le comptage de photons, on pourra se reporter à Ballentine [1998], chapitre 19, à Scully et Zubairy [1997], chapitre 4, à Gerry et Knight [2005], chapitre 5, ou à Mandel et Wolf [1995], chapitres 9 et 14.

# Chapitre 18

# Systèmes quantiques ouverts

La plupart des manuels de mécanique quantique traitent exclusivement, ou presque exclusivement, de l'évolution de systèmes fermés. Nous avons déjà examiné l'évolution de systèmes ouverts dans le § 11.4.3 et la section 15.3, et nous allons en donner une vue plus générale dans ce chapitre. L'évolution d'un système fermé est régie par l'équation de Schrödinger sous forme différentielle (4.11) ou sous forme intégrale (4.14). Cependant, un système fermé est une idéalisation, et en pratique tous les systèmes quantiques (sauf peut-être l'Univers entier) sont en contact avec un environnement. L'espace de Hilbert est alors un produit tensoriel $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$, où $\mathcal{H}_A$ est l'espace de Hilbert du système $\mathcal{A}$ auquel nous nous intéressons et $\mathcal{H}_E$ celui de l'environnement $\mathcal{E}$. Au chapitre 11, nous avons appris que l'opérateur statistique $\rho_A$ de $\mathcal{A}$ s'obtenait en prenant la trace partielle de $\rho_{AE}$ (11.10) sur les degrés de liberté de l'environnement, et l'évolution temporelle de $\rho_A$ n'est pas unitaire : elle n'est pas régie par (11.33) avec un hamiltonien hermitien. L'entropie de von Neumann $\mathrm{Tr}[\rho_A \ln \rho_A]$, qui est constante pour une évolution unitaire, dépend du temps quand le système est ouvert. Elle augmente en général parce de l'information s'échappe dans l'environnement, et il s'ensuit un comportement irréversible parce que nous ne sommes pas capables de contrôler les degrés de liberté de l'environnement. Nous en avons vu un exemple au § 15.3.1, où $\mathcal{A}$ était un atome à deux niveaux et $\mathcal{E}$ le champ électromagnétique quantifié.

Revenons au système à deux niveaux. Il sera commode d'emprunter tout au long de ce chapitre les notations de l'informatique quantique (11.110). Nous allons choisir comme vecteurs de base ceux d'un hamiltonien libre $H_0$

$$H_0 = -\frac{1}{2}\,\hbar\omega_0\sigma_z \tag{18.1}$$

et nous appelons $|0\rangle$ et $|1\rangle$ ces vecteurs

$$H_0|0\rangle = -\frac{1}{2}\,\hbar\omega_0|0\rangle \qquad H_0|1\rangle = \frac{1}{2}\,\hbar\omega_0|1\rangle \tag{18.2}$$

$\hbar\omega_0$ est donc la différence d'énergie entre l'état fondamental $|0\rangle$ et l'état excité $|1\rangle$. Les éléments de matrice $\rho_{00}$ et $\rho_{11} = 1 - \rho_{00}$ de l'opérateur statistique décrivent les populations des états $|0\rangle$ et $|1\rangle$, tandis que $\rho_{01}$ et $\rho_{10}^*$ ($\rho_{01} = \rho_{10}^*$) décrivent les cohérences. À l'équilibre thermique et à la température $T$, les populations $\rho_{00}^{\rm eq}$ et $\rho_{11}^{\rm eq}$ sont déterminées par la loi de Boltzmann

$$\frac{\rho_{11}^{\rm eq}}{\rho_{00}^{\rm eq}} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{k_{\rm B}T}\right) \tag{18.3}$$

Afin de fixer les idées, nous reprenons le cas de la RMN (section 5.2). Si les spins des protons étaient isolés, leur évolution temporelle serait régie par (11.33), avec un hamiltonien dépendant du champ magnétique constant $\vec{B}_0$ et du champ de radiofréquences $\vec{B}_1(t)$. Comme au § 15.3.1, il est commode d'utiliser le vecteur de Bloch $\vec{b} = (u, v, -w)$ (15.39) ; $w = (\rho_{11} - \rho_{00})$ décrit la différence de populations et $(u, v)$ les cohérences, $\rho_{01} = r = (u - {\rm i}v)/2$. Si les spins étaient isolés, l'équation d'évolution (11.33) de $\rho$ avec le hamiltonien (5.26) serait, en termes de populations et de cohérences

$$\begin{aligned} \dot{w} &= {\rm i}\omega_1 \left(r^* \,{\rm e}^{\,{\rm i}\omega t} - r\,{\rm e}^{-{\rm i}\omega t}\right) \\ \dot{r} &= {\rm i}\omega_0 r + \frac{{\rm i}\omega_1}{2}\, w\,{\rm e}^{\,{\rm i}\omega t} \end{aligned} \tag{18.4}$$

où $\omega_1$ est la fréquence de Rabi. Les légères différences avec (15.42)–(15.43) disparaissent à l'approximation séculaire. Afin de prendre en compte l'environnement de façon phénoménologique, nous suivons le § 15.3.1 en ajoutant deux termes de relaxation

$$\begin{aligned} \dot{w} &= {\rm i}\omega_1 \left(r^* \,{\rm e}^{\,{\rm i}\omega t} - r\,{\rm e}^{-{\rm i}\omega t}\right) - \Gamma_1(w - w_{\rm eq}) \\ \dot{r} &= {\rm i}\omega_0 r + \frac{{\rm i}\omega_1}{2}\, w\,{\rm e}^{\,{\rm i}\omega t} - \Gamma_2\, r \end{aligned} \tag{18.5}$$

Ces équations sont les *équations de Bloch* de la RMN. La forme du terme de relaxation n'est pas la plus générale possible, mais les approximations conduisant à (18.5) sont généralement justifiées : voir les commentaires suivant (18.68). Afin de donner une interprétation physique aux termes de relaxation, supposons que le champ de radiofréquences a été coupé à $t = 0$, de sorte que $\omega_1 = 0$ pour $t > 0$. La solution de (18.5) est alors

$$\begin{aligned} w(t) - w_{\rm eq} &= (w(t=0) - w_{\rm eq})\,{\rm e}^{-\Gamma_1 t} \\ r(t) &= r(t=0)\,{\rm e}^{\,{\rm i}\omega_0 t}\,{\rm e}^{-\Gamma_2 t} \end{aligned} \tag{18.6}$$

Les populations reviennent à l'équilibre avec un temps de relaxation $T_1 = 1/\Gamma_1$, le temps de relaxation longitudinale, et les cohérences avec un temps de relaxation $T_2 = 1/\Gamma_2$, le temps de relaxation transverse, introduits dans la section 5.2. La différence principale par rapport à (15.44)–(15.45) est que

nous avons maintenant deux temps de relaxation indépendants[1], tandis que dans ces équations nous avions $\Gamma_2 = \Gamma_1/2 = \Gamma/2$. Dans le cas de la RMN, $T_1$ est de l'ordre de la seconde, et $T_2 \lesssim T_1$ (avec $T_2 \ll T_1$ dans la plupart des cas, par exemple $T_2 \sim 1\,\mathrm{ms}$ et $T_1 \sim 1\,\mathrm{s}$, voir Levitt [2001]).

Le plan du chapitre est le suivant : dans la section 18.1, nous établissons la forme de Kraus de l'opérateur statistique réduit au temps $t$ en fonction de son expression à $t = 0$. Dans la section 18.2, nous étudions le cas particulier important où l'on peut écrire une équation différentielle du premier ordre pour l'évolution de l'opérateur statistique réduit, ou équation pilote du type de Lindblad. Finalement, dans la section 18.3, nous étudierons deux modèles où l'environnement est constitué d'un bain thermique d'oscillateurs harmoniques indépendants : le premier système couplé à cet environnement sera un système à deux niveaux typique des sytèmes rencontrés en optique quantique, et le second une particule brownienne. Ce dernier cas sera particulièrement intéressant dans la mesure où il nous permettra de comprendre le phénomène de décohérence pour la superposition de deux paquets d'onde dans le cas de particules lourdes.

## 18.1 Superopérateurs

### 18.1.1 Représentation de Kraus

Dans cette section, nous allons essayer de répondre à la question suivante : si un état de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$ subit une évolution unitaire $U_{AE}$ entre $t = 0$ et $t$, quelle est l'expression au temps $t$ de l'opérateur statistique de $\mathcal{A}$ ? La réponse est donnée par la représentation de Kraus que nous allons maintenant établir. Nous supposons que le système et l'environnement ont été découplés jusqu'à $t = 0$, et à cet instant l'opérateur statistique global est un produit tensoriel $\rho_{AE} = \rho_A \otimes \rho_E$. Il sera commode de supposer en outre que $\rho_E$ est de la forme $|0_E\rangle\langle 0_E|$ : cette supposition n'enlève rien à la généralité, en raison de la linéarité des résultats. Nous avons donc à $t = 0$

$$\rho_{AE}(t=0) = \rho_A \otimes \rho_E = \rho_A \otimes |0_E\rangle\langle 0_E| \tag{18.7}$$

Le système bipartite $\mathcal{AE}$ évolue pendant l'intervalle de temps $t$ suivant

$$\rho_{AE}(t=0) \equiv \rho_{AE} \to \rho_{AE}(t) \equiv \rho'_{AE} = U_{AE}\, \rho_{AE}\, U^\dagger_{AE} \tag{18.8}$$

où $U_{AE}$ est obtenu en résolvant (11.33) dans $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$. Pour trouver l'opérateur statistique $\rho_A(t) = \rho'_A$ du système $\mathcal{A}$, on effectue une trace partielle[2]

$$\rho'^{A}{}_{mn} = \sum_{\mu,k,l} U^{AE}_{m\mu;k0}\, \rho^A_{kl}\, (U^{AE})^\dagger_{l0;n\mu} \tag{18.9}$$

1. On rencontre aussi des équations de Bloch avec deux temps de relaxation indépendants dans la physique des lasers ; voir par exemple Mandel and Wolf [1995], chapitre 18.

2. Pour la clarté des notations, nous écrivons $AE$ en exposant dans les éléments de matrice.

où nous avons fait explicitement usage de la forme particulière (18.7) de l'opérateur statistique initial $\rho_{AE}$. Les éléments de matrice de $U_{AE}$ sont

$$U^{AE}_{m\mu;n\nu} = \langle m_A \otimes \mu_E | U_{AE} | n_A \otimes \nu_E \rangle.$$

L'équation (18.9) peut être écrite en fonction de l'opérateur $M_\mu$ qui agit dans $\mathcal{H}_A$ défini par

$$M_\mu = \langle \mu_E | U_{AE} | 0_E \rangle \tag{18.10}$$

Écrivant $\rho'_A = \mathcal{K}(\rho_A)$, (18.9) devient (figure 18.1)

$$\mathcal{K}(\rho_A) = \sum_\mu M_\mu \, \rho_A \, M_\mu^\dagger \tag{18.11}$$

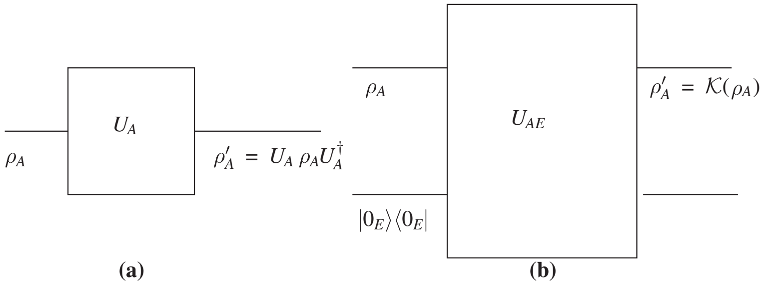



FIG. 18.1 – Représentation graphique (a) d'une évolution unitaire, (b) de l'évolution (18.11).

L'unitarité de $U_{AE}$ implique que l'ensemble des opérateurs $M_\mu$ vérifie la relation de fermeture (il faut noter l'ordre des opérateurs : $\sum_\mu M_\mu M_\mu^\dagger$ n'a pas d'expression simple dans le cas général)

$$\sum_\mu M_\mu^\dagger M_\mu = \sum_\mu \langle 0_E | U_{AE}^\dagger | \mu_E \rangle \langle \mu_E | U_{AE} | 0_B \rangle = I_A \tag{18.12}$$

L'équation (18.11) est la *représentation de Kraus* de $\rho'_A$. Cette représentation de Kraus, jointe à la relation de fermeture (18.12), définit une application linéaire $\rho_A \to \rho'_A = \mathcal{K}(\rho_A)$. $\mathcal{K}$ est appelé *superopérateur*, car il agit dans l'espace vectoriel des opérateurs : les opérateurs $F_i$ sur $\mathcal{H}_A$ forment un espace vectoriel et un produit scalaire $(\bullet, \bullet)$ peut être défini sur cet espace par $(F_i, F_j) = \mathrm{Tr}\,[F_i^\dagger F_j]$. Si $\mathcal{H}_A$ est de dimension infinie, il faut se restreindre aux opérateurs de Hilbert-Schmidt $F$ tels que $\mathrm{Tr}\,[F^\dagger F]$ existe.

L'opérateur $\rho'_A$ doit obéir aux trois conditions suivantes pour être un opérateur statistique respectable :

(i) $\rho'_A$ doit être hermitien, ce qui est manifestement le cas ;
(ii) on doit avoir $\mathrm{Tr}\,\rho'_A = 1$, ce qui résulte de (18.12) ;
(iii) $\rho'_A$ doit être positif, et de fait avec $|\psi_A^\mu\rangle = M_\mu^\dagger|\varphi_A\rangle$

$$\langle\varphi_A|\rho'_A|\varphi_A\rangle = \sum_\mu (\langle\varphi_A|M_\mu)\rho_A(M_\mu^\dagger|\varphi_A\rangle) = \sum_\mu \langle\psi_A^\mu|\rho_A|\psi_A^\mu\rangle \geq 0$$

Inversement, toute représentation du type (18.11) peut toujours se déduire d'une représentation unitaire dans un certain espace de Hilbert $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$, ce que nous allons montrer. Choisissons comme espace $\mathcal{H}_E$ un espace de Hilbert dont la dimension est au moins égale au nombre de termes dans (18.11), soit $\{|\mu_E\rangle\}$ une base orthonormale dans $\mathcal{H}_E$ et $|0_E\rangle$ un vecteur de cette base. *Définissons* l'action de $U_{AE}$ sur le vecteur $|\varphi_A \otimes 0_E\rangle$, où $|\varphi_A\rangle$ est un vecteur arbitraire $\mathcal{H}_A$, de la façon suivante

$$U_{AE}|\varphi_A \otimes 0_E\rangle = \sum_\mu (M_\mu \otimes I_E)|\varphi_A \otimes \mu_E\rangle \tag{18.13}$$

L'équation (18.13) décrit un *saut quantique* : dans l'intervalle de temps $[0, t]$, le système $\mathcal{AE}$ “saute” de l'état $|\varphi_A \otimes 0_E\rangle$ à une superposition d'états $M_\mu|\varphi_A \otimes \mu_E\rangle$. L'interpétation physique de cette équation est importante : supposons que nous effectuions une mesure de l'environnement et que le résultat soit $|\mu\rangle$. Alors, après la mesure, le système $\mathcal{A}$ se trouve dans l'état $M_\mu|\varphi_A\rangle$ : le saut quantique décrit l'évolution de $\mathcal{A}$ sous l'effet d'une mesure de l'environnement (voir § 11.4.3 pour un exemple). L'opérateur $U_{AE}$ conserve le produit scalaire

$$\Big(\sum_\mu \langle\psi_A \otimes \mu_E|[M_\mu^\dagger \otimes I_B]\Big)\Big(\sum_\nu [M_\nu \otimes I_E]|\varphi_A \otimes \nu_E\rangle\Big) = \langle\psi_A|\Big(\sum_\mu M_\mu^\dagger M_\mu\Big)|\varphi_A\rangle$$
$$= \langle\psi_A|\varphi_A\rangle$$

et par conséquent $U_{AE}$, qui est défini *a priori* seulement sur des vecteurs particuliers de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$, peut être prolongé comme opérateur unitaire sur $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$. Prenant la trace partielle, on trouve

$$\mathrm{Tr}_\mathcal{E}\Big(U_{AE}|\varphi_A \otimes 0_E\rangle\,\langle\varphi_A \otimes 0_E|U_{AE}^\dagger\Big) = \sum_\mu M_\mu|\varphi_A\rangle\langle\varphi_A|M_\mu^\dagger$$

de sorte que tout opérateur statistique $\rho_A$, qui peut être écrit comme $\sum_i \mathsf{p}_i|\varphi_A^i\rangle\langle\varphi_A^i|$, se transforme suivant (18.11). Nous verrons ultérieurement que toute loi d'évolution “raisonnable” pour $\rho_A$ est de la forme (18.11). Le fait que l'on puisse toujours trouver une représentation unitaire (18.13) est à première vue quelque peu surprenant, car en principe les systèmes $\mathcal{A}$ et $\mathcal{E}$ sont intriqués à $t = 0$, de sorte que supposer un état initial de la forme (18.7) semble une hypothèse très forte. Mais il semble que, *si le seul objectif est de décrire l'évolution de* $\rho_A$, il est toujours possible de trouver un environnement fictif tel qu'il n'y ait pas d'intrication entre le système et son environnement à $t = 0$.

Pour conclure cette sous-section, énonçons quelques résultats généraux sur la représentation de Kraus. Comme certaines preuves sont assez techniques, nous les omettrons en renvoyant le lecteur à la bibliographie[3]. Une question intéressante est la suivante : quelles sont les conditions “raisonnables” nécessaires pour prouver la représentation (18.11) ? *A priori*, il semblerait que l'on doive imposer les conditions suivantes.

(i) $\mathcal{K}$ doit être une opération linéaire[4].

$$\mathcal{K}(\lambda\rho_A + \mu\rho_B) = \lambda\mathcal{K}(\rho_A) + \mu\mathcal{K}(\rho_B)$$

(ii) $\mathcal{K}(\rho_A)$ doit être hermitien.

$$\mathcal{K}(\rho_A) = [\mathcal{K}(\rho_A)]^\dagger$$

(iii) $\mathcal{K}$ doit conserver la trace : $\mathrm{Tr}[\mathcal{K}(\rho_A)] = 1$.

(iv) $\mathcal{K}(\rho_A)$ doit être un opérateur positif : $\mathcal{K}(\rho_A) \geq 0$.

Mais la condition (iv) est en fait trop faible. Supposons que $\mathcal{A}$ soit couplé à un environnement $\mathcal{E}$ et qu'il existe un autre système $\mathcal{C}$ auquel $\mathcal{A}$ a été couplé dans un passé lointain. Si $\mathcal{A}$ évolue et $\mathcal{C}$ ne le fait pas, alors $\mathcal{K}(\rho_A) \otimes I_C$ doit être un opérateur positif. Il en résulte que $\mathcal{K}(\rho_A)$ doit obéir à une condition (iv′) plus forte que (iv)

(iv′) $\mathcal{K}(\rho_A)$ est *complètement positif* : $\mathcal{K}(\rho_A) \otimes I_C \geq 0$, pour tout système $\mathcal{C}$.

Un exemple d'opérateur qui obéit aux conditions (i) à (iii), mais non à (iv′), est la transposition (exercice 17.4.1)

$$\mathcal{K}(\rho_A) = \rho_A^T$$

Nous pouvons maintenant énoncer sans démonstration le *théorème de représentation de Kraus* : toute opération $\rho \to \mathcal{K}(\rho)$ dans un espace de dimension $d_A$ qui obéit aux conditions (i) à (iii) et (iv') peut s'écrire sous la forme

$$\boxed{\mathcal{K}(\rho) = \sum_{\mu=0}^{K-1} M_\mu\,\rho\,M_\mu^\dagger, \qquad \sum_{\mu=0}^{K-1} M_\mu^\dagger\,M_\mu = I} \tag{18.14}$$

où on peut toujours choisir $(K-1) \leq d_A^2$, $d_A$ étant la dimension de $\mathcal{H}_A$ ; $K$ est le *nombre de Kraus*. Il existe toujours une expression pour $\mathcal{K}(\rho)$ comprenant un nombre de termes $\leq d_A^2$, indépendamment de la dimension de l'espace de Hilbert $\mathcal{H}_E$ de l'environnement, même si cette dimension est infinie.

3. Voir par exemple Haroche et Raimond [2006], chapitre 4, ou Breuer et Petruccione [2002], chapitre 3.

4. Voir cependant Preskill [1999], section 3.2, pour une discussion de la linéarité ; les arguments selon lesquels une évolution non linéaire doit être exclue ne sont pas entièrement incontournables.

La représentation de Kraus n'est pas unique, mais deux représentations sont nécessairement reliées par une transformation unitaire : si

$$\mathcal{K}(\rho) = \sum_{\mu=0}^{K-1} M_\mu \, \rho \, M_\mu^\dagger = \sum_{\mu=0}^{L-1} N_\mu \, \rho \, N_\mu^\dagger$$

alors $N_\nu$ est relié à $M_\mu$ par une transformation unitaire

$$N_\nu = \sum_\mu U_{\nu\mu} M_\mu$$

Comme certains éléments de matrice de $U_{\nu\mu}$ peuvent s'annuler, le nombre de termes non nuls n'est pas nécessairement identique dans les deux décompositions : il n'est pas obligatoire que $K = L$.

### 18.1.2 Modèle pour l'amortissement de phase

Il est instructif d'appliquer la notion de superopérateur à un exemple déjà introduit au § 11.4.2, celui de *l'amortissement de phase*. Un autre exemple traité au chapitre 11, celui de l'émission spontanée, est examiné à l'exercice 18.4.2 dans le cadre de la représentation de Kraus. L'espace $\mathcal{H}_E$ est choisi de dimension 3, et l'évolution unitaire (saut quantique) est supposée de la forme

$$\begin{aligned} U_{AE}|0_A \otimes 0_E\rangle &= \sqrt{1-\mathsf{p}}\; |0_A \otimes 0_E\rangle + \sqrt{\mathsf{p}}\; |0_A \otimes 1_E\rangle \\ U_{AE}|1_A \otimes 0_E\rangle &= \sqrt{1-\mathsf{p}}\; |1_A \otimes 0_E\rangle + \sqrt{\mathsf{p}}\; |1_A \otimes 2_E\rangle \end{aligned} \tag{18.15}$$

Autrement dit, l'environnement reste dans $|0_E\rangle$ avec la probabilité $1 - \mathsf{p}$, et il passe dans un autre état qui dépend de celui de $\mathcal{A}$ avec la probabilité $\mathsf{p}$. La représentation de Kraus suit immédiatement de (18.13) :

$$M_0 = \sqrt{1-\mathsf{p}}\; I, \qquad M_1 = \sqrt{\mathsf{p}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad M_2 = \sqrt{\mathsf{p}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{18.16}$$

et la matrice statistique transformée est

$$\mathcal{K}(\rho) = (1-\mathsf{p})\rho + \mathsf{p} \begin{pmatrix} \rho_{00} & 0 \\ 0 & \rho_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{00} & (1-\mathsf{p})\rho_{01} \\ (1-\mathsf{p})\rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix} \tag{18.17}$$

On note que cette transformation affecte uniquement les cohérences (les éléments de matrice non diagonaux de $\rho$), d'où la terminologie "amortissement de phase". De plus, si nous appliquons $\mathcal{K}$ deux fois, il vient

$$\mathcal{K}^2(\rho) = \mathcal{K}[\mathcal{K}(\rho)] = \begin{pmatrix} \rho_{00} & (1-\mathsf{p})^2\rho_{01} \\ (1-\mathsf{p})^2\rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix}$$

Supposons maintenant que le saut quantique se passe dans un intervalle de temps court $\Delta t$, avec une probabilité proportionnelle[5] à $\Delta t$ : $\mathsf{p} = \Gamma \Delta t \ll 1$. Écrivons $t = n\Delta t, n \gg 1$, et effectuons $n$ itérations de $\mathcal{K}$ :

$$\mathcal{K}^n(\rho) = \begin{pmatrix} \rho_{00} & (1-\mathsf{p})^n \rho_{01} \\ (1-\mathsf{p})^n \rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \rho_{00} & \rho_{01}\,\mathrm{e}^{-\Gamma t} \\ \rho_{10}\,\mathrm{e}^{-\Gamma t} & \rho_{11} \end{pmatrix} \qquad (18.18)$$

Le temps de relaxation des cohérences (le temps de relaxation transverse $T_2$ de la RMN) est $T_2 = 1/\Gamma$. Si le système à deux niveaux est préparé au temps $t = 0$ dans un état pur qui est une superposition *cohérente* de $|0\rangle$ et $|1\rangle$

$$|\varphi\rangle = \lambda|0\rangle + \mu|1\rangle, \qquad \rho_{00} = 1 - \rho_{11} = |\lambda|^2, \qquad \rho_{01} = \rho_{10}^* = \lambda\mu^*$$

alors, après un temps $t \gg 1/\Gamma$, l'état quantique est transformé en une superposition *incohérente* de $|0\rangle$ et $|1\rangle$ :

$$t \gg 1/\Gamma : \quad \rho(t) \to |\lambda|^2|0\rangle\langle 0| + |\mu|^2|1\rangle\langle 1|$$

Comme application, donnons une discussion heuristique de la décohérence d'une superposition d'états quantiques distincts d'un système macroscopique. Identifions $|0_A\rangle$ et $|1_A\rangle$ aux états propres de position $|x\rangle$ et $|-x\rangle$ (ou, de façon plus réaliste, à des superpositions de paquets d'ondes ne se recouvrant pas centrés en $x$ et $-x$), d'une “particule de poussière”,[6] qui diffuse élastiquement des photons de son environnement initialement dans l'état $|0_E\rangle$. La diffusion des particules de poussière localisées en $|x\rangle$ ($|-x\rangle$) envoie les photons dans l'état $|1_E\rangle$ ($|2_E\rangle$), tandis que la particule de poussière reste dans son état initial. Si la distance $2|x|$ entre les centres des paquets d'ondes est suffisamment grande par rapport à longueur d'onde des photons diffusés, les états $|1_E\rangle$ et $|2_E\rangle$ seront approximativement orthogonaux, $\langle 1_E|2_E\rangle \simeq 0$, parce que la diffusion des photons est localisée dans l'espace. Nous sommes donc dans la situation décrite par (18.15). Si la particule de poussière est initialement dans une superposition cohérente de deux paquets d'ondes

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + |-x\rangle)$$

la cohérence entre les paquets d'ondes sera détruite au bout d'un temps $\sim 1/\Gamma$. Le taux de décohérence $\Gamma$ est proportionnel à la section efficace $\sigma$, et une estimation grossière pour $\sigma$ est $\sigma \propto R^2 \propto M^{2/3}$, où $R$ est le rayon de la particule de poussière et $M$ sa masse. Le temps de décohérence $\tau_{\rm dec}$ est proportionnel à $M^{-2/3}$

$$\tau_{\rm dec} \simeq \frac{1}{\Gamma} \propto \frac{1}{M^{2/3}}$$

5. Ceci est une hypothèse forte : en général, nous nous attendons à ce que les *amplitudes* soient proportionnelles à $\Delta t$ si les transitions ont lieu vers un état isolé, voir (5.65). Il faut une transition vers un continuum d'états comme dans la règle d'or de Fermi (8.152), pour que les *probabilités* soient proportionnelles à $\Delta t$.

6. Une particule de poussière est grande à l'échelle microscopique et petite à l'échelle macroscopique.

Le temps de décohérence est beaucoup plus court que le temps de relaxation $\tau$ caractéristique du mouvement de la particule, par exemple le temps de relaxation $\tau$ de sa vitesse, le temps mis par la particule pour modifier son mouvement sous l'action de la diffusion de photons : $\tau_{\rm dec} \ll \tau$. En effet, le temps de décohérence $\tau_{\rm dec}$ est contrôlé par la diffusion d'un seul photon, et $\tau$ par la diffusion d'un grand nombre de photons : il faut beaucoup de photons pour modifier la vitesse de façon appréciable, mais un seul photon suffit à détruire la cohérence de phase. Si nous envisageons une expérience d'interférences du type fentes d'Young, lorsque le temps de transit entre les fentes et l'écran de détection est plus grand que $\tau_{\rm dec}$, aucune interférence ne sera possible, parce que la cohérence des deux paquets d'ondes quittant les fentes est détruite avant l'arrivée sur l'écran : une information sur le chemin suivi est codée dans l'environnement.

Ainsi que nous l'avons vu au § 11.4.4, une superposition d'états quantiques macroscopiquement distincts est appelée chat de Schrödinger. Nous venons de voir que ce chat de Schrödinger est détruit en un temps $\sim \tau_{\rm dec}$ , et la situation finale est celle d'un mélange incohérent. Le mécanisme responsable de la décohérence sélectionne une base privilégiée : la diffusion de photons sélectionne une base d'états de position, parce que les photons diffusés par des états de position différents sont expédiés dans des états orthogonaux, en conformité avec le mécanisme général de la décohérence examiné au § 11.4.2. En fait, il n'est pas nécessaire que les états finaux des photons soient orthogonaux. Si l'on suppose, par exemple, que les états $|1_E\rangle$ et $|2_E\rangle$ obéissent à $\langle 1_E|2_E\rangle = 1-\varepsilon$, alors la probabilité $\mathsf{p}$ est remplacée par $\mathsf{p} \to \varepsilon\mathsf{p}$ et le temps de décohérence par $\tau_{\rm dec} \to \tau_{\rm dec}/\varepsilon$.

## 18.2 Équations pilotes : la forme de Lindblad

### 18.2.1 L'approximation markovienne

Le système d'équations de Bloch (18.5) que nous avons écrit à partir d'arguments heuristiques est typique de ce que l'on appelle une *équation pilote*, ou *équation maîtresse* : l'évolution temporelle de l'opérateur statistique est donnée par une équation différentielle, ou, en d'autres termes, *l'évolution est locale dans le temps*. Par exemple, les équations de Bloch optiques (15.48)–(15.49) sont équivalentes à (11.87) si l'on ignore la partie unitaire $(-\mathrm{i}/\hbar)[H,\rho]$ de l'évolution, étant donné que (11.87) peut s'écrire sous la forme d'une équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\frac{\Gamma}{2}\begin{pmatrix} -2\rho_{11}(t) & \rho_{01}(t) \\ \rho_{10}(t) & 2\rho_{11}(t)\end{pmatrix} \tag{18.19}$$

On vérifie sans peine que (18.19) peut se mettre sous la forme

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \frac{\Gamma}{2}\left[2\sigma_+\,\rho\,\sigma_- - \{\sigma_-\sigma_+,\rho\}\right] \tag{18.20}$$

où[7] $\sigma_\pm = (\sigma_x \pm \mathrm{i}\sigma_y)/2$ (*cf.* 5.24)) et $\{A, B\}$ désigne l'anti-commutateur (14.47) de deux opérateurs $A$ et $B$ :

$$\{A, B\} = AB + BA \tag{18.21}$$

En fait, on peut ajouter à (18.21) une évolution unitaire comme dans (18.2) :

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H, \rho] + \frac{\Gamma}{2}\left[2\sigma_+\,\rho\,\sigma_- - \{\sigma_-\sigma_+, \rho\}\right] \tag{18.22}$$

Si le hamiltonien $H$ est indépendant du temps, $H = H_0$, par exemple comme dans (18.1), il sera commode d'introduire le point de vue de l'interaction

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}(t) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t/\hbar}\,\rho(t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t/\hbar}\\ \tilde{\sigma}_\pm(t) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t/\hbar}\,\sigma_\pm\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t/\hbar} = \mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}\omega_0 t}\sigma_\pm\end{aligned} \tag{18.23}$$

L'équation (18.22) est un exemple d'équation pilote sous la forme de Lindblad, dont nous donnons maintenant une déduction générale.

Cet exemple, comme celui donné au § 18.1.2, montre que l'on peut passer de la forme de Kraus (18.14) à l'équation pilote sous la forme de Lindblad (18.22). Cependant, notre déduction dépendait de l'hypothèse cruciale (et forte !) que la probabilité $\mathsf{p}$ était proportionnelle à $\Delta t$. Dans le cas général, il est loin d'être évident qu'il soit possible d'obtenir une équation différentielle pour l'évolution non unitaire de $\rho(t)$, parce que nous nous attendons à des *effets de mémoire*. De l'information s'échappe depuis le système vers l'environnement, mais inversement de l'information passe aussi de l'environnement vers le système. Schématiquement, une équation avec effets de mémoire prend la forme d'une équation intégro-différentielle qui est *non locale dans le temps* :

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\int_{-\infty}^{t} \gamma(t - t')\rho(t')\mathrm{d}t' \tag{18.24}$$

où $\gamma(t - t')$ est la fonction de mémoire, ou noyau de mémoire.[8] Si le temps caractéristique de relaxation $\tau_*$ de $\gamma(t - t')$ est beaucoup plus petit que le temps typique $\tau$ d'évolution de $\rho$, $\tau_* \ll \tau$, nous pouvons écrire (18.24) sous la forme approchée

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} \simeq -\rho(t)\int_{-\infty}^{t} \gamma(t')\,\mathrm{d}t' = -\Gamma\,\rho(t) \tag{18.25}$$

et nous obtenons une équation pilote. L'approximation de mémoire courte dans (18.25) est aussi appelée *approximation markovienne* : en effet, $\mathrm{d}\rho/\mathrm{d}t$

7. Attention au fait que Nielsen et Chuang [2001] utilisent la convention opposée pour $\sigma_\pm$. Nous avons choisi une convention compatible avec la définition (9.4) des opérateurs moment angulaire $J_\pm$, et qui de plus est compatible avec celle de la théorie des champs, car $\sigma_+$ ($\sigma_-$) est un opérateur de fréquence positive (négative) suivant la définition du § 17.4.1, comme $a$ ($a^\dagger$) ; voir (17.18).

8. En général, (18.24) prend une forme matricielle, et des termes additionnels sont présents ; voir les références dans la bibliographie.

dépend seulement de $\rho$ au temps $t$, et pas de sa valeur à des temps antérieurs $t' < t$, et (18.25) est locale dans le temps. L'approximation markovienne sera valable s'il existe deux échelles de temps bien distinctes : $\tau$, le temps typique d'évolution de $\rho$, et $\tau_*$, le temps typique de relaxation de la fonction de mémoire, avec $\tau_* \ll \tau$. L'hypothèse de deux échelles de temps bien distinctes est habituelle dans de nombreux problèmes de mécanique statistique hors équilibre.

Examinons les conditions où nous pouvons espérer déduire une équation pilote à partir de la représentation de Kraus. La première étape consiste à utiliser une "granulation"[9] de $\rho$, sur un intervalle de temps typique $\Delta t$ tel que

$$\tau_* \ll \Delta t \ll \tau \tag{18.26}$$

$$\rho(t) \to \frac{1}{\Delta t}\int_t^{t+\Delta t} \rho(t')\mathrm{d}t' \tag{18.27}$$

Cette granulation sert à lisser les fluctuations de $\rho$ sur des temps $\sim \tau_*$, fluctuations qui sont incompatibles avec le caractère markovien. Nous écrivons alors la représentation de Kraus pour l'évolution entre $t$ et $t + \Delta t$ sous la forme

$$\frac{\mathrm{d}\rho_A}{\mathrm{d}t} \simeq \frac{\Delta\rho_A}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t}\big[\rho_A(t+\Delta t) - \rho_A(t)\big] = \frac{1}{\Delta t}\big[\mathcal{K}_{t,t+\Delta t}[\rho_A(t)] - \rho_A(t)\big]$$

Deux conditions doivent être satisfaites pour que la déduction de l'équation pilote soit possible.

(i) L'opérateur statistique du système bipartite $\mathcal{AE}$ doit se factoriser approximativement au temps $t$ sous la forme $\rho_{AE}(t) \simeq \rho_A(t) \otimes \rho_E(t)$, où $\rho_A(t) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{E}}[\rho_{AE}(t)]$ et $\rho_E(t) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{A}}[\rho_{AE}(t)]$. Cette condition est nécessaire pour que l'on puisse écrire une représentation de Kraus au temps $t + \Delta t$.

(ii) Le superopérateur $\mathcal{K}_{t,t+\Delta t}$ doit dépendre uniquement de $\Delta t$, et pas de $t$.

Nous donnerons des précisions supplémentaires sur ces deux conditions dans la section suivante, dans le cadre d'un modèle spécifique pour $\mathcal{E}$ et de son interaction avec $\mathcal{A}$. Un énoncé général est que (i) et (ii) sont valables pourvu que $|\mathcal{W}|\tau_*/\hbar \ll 1$, où $|\mathcal{W}|$ est un élément de matrice typique de l'interaction $\mathcal{AE}$.

### 18.2.2 L'équation de Lindblad

Supposons que les conditions précédentes (i) et (ii) soient vérifiées. Nous pouvons alors écrire d'après (18.14)

$$\mathcal{K}_{\Delta t}[\rho_A(t)] = \sum_\mu M_\mu(\Delta t)\rho_A(t)M_\mu^\dagger(\Delta t) \tag{18.28}$$

9. Traduction de "coarse graining".

et $[\mathcal{K}_{\Delta t}[\rho_A(t)] - \rho_A(t)]$ est du premier ordre en $\Delta t$ :

$$\mathcal{K}_{\Delta t}[\rho_A(t)] = \rho_A(t) + \mathcal{O}(\Delta t)$$

Il s'ensuit que l'un des $M_\mu$, que nous appellerons par convention $M_0$, doit avoir un développement de la forme

$$M_0(t) = I_A + \left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H - K\right)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t)^2 \tag{18.29}$$

où $H$ et $K$ sont des opérateurs hermitiens. Dans ces conditions, le premier terme de (18.28) s'écrit

$$M_0(\Delta t)\rho_A(t)M_0^\dagger(\Delta t) = \rho_A(t) - \frac{\mathrm{i}\Delta t}{\hbar}[H, \rho_A] - \Delta t\{K, \rho_A\} + \mathcal{O}(\Delta t)^2 \tag{18.30}$$

Les autres termes de (18.28) doivent être d'ordre $\sqrt{\Delta t}$

$$M_\mu(\Delta t) = L_\mu\sqrt{\Delta t} \tag{18.31}$$

et la relation de fermeture (18.14) conduit à

$$I_A = M_0^\dagger M_0 + \sum_{\mu>0} M_\mu^\dagger M_\mu = I_A - 2K\Delta t + \left(\sum_{\mu>0} L_\mu^\dagger L_\mu\right)\Delta t$$

qui implique

$$K = \frac{1}{2}\sum_{\mu>0} L_\mu^\dagger L_\mu \tag{18.32}$$

En combinant (18.30) et (18.32) et en supprimant désormais l'indice $A$ de $\rho$, nous aboutissons à *l'équation de Lindblad* pour l'opérateur statistique $\rho$ de $\mathcal{A}$ :

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \mathcal{L}\rho = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H, \rho] - \frac{1}{2}\{K, \rho\} + \sum_{\mu>0} L_\mu\,\rho\,L_\mu^\dagger} \tag{18.33}$$

Les opérateurs $L_\mu$ sont les *opérateurs de sauts quantiques.* Ainsi que nous l'avons déjà observé, ils décrivent la façon dont l'état de $\mathcal{A}$ est modifié par une mesure effectuée sur l'environnement. L'équation (18.33) est la forme la plus générale d'une équation pilote préservant la positivité de $\rho$ si $\mathcal{L}$ est un (super)opérateur borné, et donc en particulier pour un système et un environnement décrits par un espace de Hilbert de dimension finie. Cependant, la condition est suffisante mais pas nécessaire, et il existe des équations de Lindblad parfaitement correctes comme (18.36), même lorsque $\mathcal{L}$ n'est pas borné. Le superopérateur $\mathcal{L}$ est appelé le *liouvillien.* La solution de (18.33) s'écrit formellement

$$\rho(t) = \mathrm{e}^{\mathcal{L}t}\,\rho(t=0) = V(t)\rho(t=0)$$

et comme $V(t)$ vérifie la propriété $V(t_1 + t_2) = V(t_2)V(t_1)$, on dit que $V(t)$ définit un *semi-groupe dynamique*.[10]

Il est instructif de redémontrer les équations de Bloch (18.20) à partir de la forme de Lindblad (18.33). Utilisant les expressions de l'exercice 18.4.2 de $M_0$ et $M_1$ pour le modèle d'émission spontanée, nous pouvons écrire $M_0$ et $M_1$ sous la forme

$$M_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\Gamma}{2}\,\Delta t \end{pmatrix}, \qquad M_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\Gamma \Delta t} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ou, en termes de matrices de Pauli,

$$M_0 = I - \frac{\Gamma \Delta t}{2} \sigma_- \sigma_+, \qquad M_1 = \sqrt{\Gamma \Delta t}\; \sigma_+$$

Les opérateurs $K$ et $L_1$ sont donc

$$K = \frac{\Gamma}{2}\,\sigma_- \sigma_+, \qquad L_1 = \sqrt{\Gamma}\; \sigma_+ \tag{18.34}$$

et nous retrouvons (18.20) à partir de (18.33).

### 18.2.3 Exemple : l'oscillateur harmonique amorti

Considérons un oscillateur harmonique, par exemple un mode d'une cavité couplé au champ électromagnétique quantifié *via* les imperfections des miroirs, en supposant pour simplifier que l'ensemble est à température nulle ; le cas d'une température différente de zéro sera examiné au § 18.3.3. Si l'oscillateur est initialement dans un état excité, il peut seulement perdre de l'énergie en dégringolant les niveaux par émission spontanée de photons ; il ne peut pas absorber de photons, car il n'y a pas de photons disponibles à température nulle. Il existe donc un seul opérateur de saut quantique $L_1$, qui doit être proportionnel à l'opérateur d'annihilation $a$ (il est utile de se souvenir de l'analogie entre l'opérateur d'annihilation $a$ (10.6) et $\sigma_+$ ; voir la note 7) :

$$L_1 = \sqrt{\Gamma}\; a \tag{18.35}$$

On peut alors écrire par inspection l'équation de Linblad, par comparaison avec (18.22) :

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[H_0, \rho] + \frac{1}{2}\,\Gamma \Big[ 2a\rho a^\dagger - \{a^\dagger a, \rho\} \Big] \tag{18.36}$$

où $H_0 = \omega_0 a^\dagger a$ est le hamiltonien libre. Dans cette démonstration, nous avons raté la renormalisation radiative des niveaux d'énergie due à l'interaction entre l'oscillateur et le champ quantifié, qui est appelé *déplacement Lamb* et qui sera

10. Semi-groupe parce que l'inverse de $V(t)$ n'existe pas.

calculée au § 18.3.3. De plus, une démonstration complète de (18.36) montre que celle-ci est valable sous la condition $\Gamma \ll \omega_0$. Cette condition nous permet d'ignorer le couplage entre éléments de matrice de l'opérateur statistique qui évoluent avec des fréquences différentes, par exemple le couplage entre populations et cohérences (exercice 18.4.8). Nous nous débarrassons du commutateur en passant dans le point de vue de l'interaction (comparer avec (5.57))

$$\begin{aligned}\tilde{a}(t) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar}\, a\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t/\hbar} = a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\\ \tilde{a}^\dagger(t) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar}\, a^\dagger\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t/\hbar} = a^\dagger\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}\end{aligned} \tag{18.37}$$

d'où

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}}{\mathrm{d}t} = \Gamma\Big[\tilde{a}\,\tilde{\rho}\,\tilde{a}^\dagger - \frac{1}{2}\{\tilde{a}^\dagger\tilde{a}, \tilde{\rho}\}\Big] = \Gamma\Big[a\,\tilde{\rho}\,a^\dagger - \frac{1}{2}\{a^\dagger a, \tilde{\rho}\}\Big] \tag{18.38}$$

Nous avons utilisé (18.37) pour obtenir la seconde expression. En l'absence d'amortissement ($\Gamma = 0$), la valeur moyenne de l'opérateur

$$\overline{a} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t/\hbar}\, a\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar}$$

est indépendante du temps. Si $\Gamma \neq 0$, nous déduisons de (18.38) l'équation d'évolution pour sa valeur moyenne

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\overline{a}\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathrm{Tr}\,(\overline{a}\,\rho) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathrm{Tr}\,\left(a\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t}\,\rho\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathrm{Tr}\,(a\,\tilde{\rho}) = \mathrm{Tr}\left(a\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}}{\mathrm{d}t}\right)$$

et donc

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\left(a\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}}{\mathrm{d}t}\right) &= \frac{\Gamma}{2}\,\mathrm{Tr}\,\left[2a^2\tilde{\rho}a^\dagger - aa^\dagger a\tilde{\rho} - a\tilde{\rho}a^\dagger a\right]\\ &= \frac{\Gamma}{2}\,\mathrm{Tr}\,\left[[a^\dagger, a]a\rho\right] = -\frac{\Gamma}{2}\,\langle\overline{a}\rangle\end{aligned}$$

Nous en déduisons la loi de décroissance

$$\langle\overline{a}(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\Gamma t/2}\,\langle\overline{a}(t=0)\rangle \tag{18.39}$$

Un argument analogue montre que le nombre moyen d'occupation $n(t) = \langle a^\dagger a\rangle$ décroît avec un temps de relaxation $1/\Gamma$ (exercice 18.4.6)

$$n(t) = \mathrm{e}^{-\Gamma t}\, n(t=0) \tag{18.40}$$

Si l'état initial de l'oscillateur est un état cohérent (§ 11.2.1) $|z\rangle$ à $t = 0$, l'évolution temporelle conduit à

$$|z\rangle \to |z\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\,\mathrm{e}^{-\Gamma t/2}\rangle$$

et l'état cohérent ne s'intrique pas avec son environnement, bien qu'il décroisse lentement ($\Gamma \ll \omega_0$) vers l'état du vide. En revanche, si l'on part d'une superposition linéaire d'états cohérents $|z_1\rangle$ et $|z_2\rangle$

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|z_1\rangle + |z_2\rangle\right)$$

comme on le montre dans l'exercice 18.4.6, les termes non diagonaux de la matrice statistique décroissent comme

$$\exp\left[-\frac{1}{2}\,\Gamma|z_1 - z_2|^2 t\right]$$

Le taux de décohérence $\Gamma_{\rm dec}$ est beaucoup plus grand que le taux d'amortissement $\Gamma$ si $|z_1 - z_2|^2 \gg 1$ :

$$\Gamma_{\rm dec} = \frac{1}{2}\,\Gamma|z_1 - z_2|^2. \tag{18.41}$$

Il est proportionnel au carré de la "distance" $|z_1 - z_2|$ entre les deux états cohérents. Les états cohérents sont donc des états pointeurs.

## 18.3 Couplage à un bain thermique d'oscillateurs

### 18.3.1 Équations d'évolution exactes

Dans cette section, nous nous proposons de donner une image plus quantitative du phénomène de décohérence en étudiant un modèle explicite semi-réaliste. Le modèle décrit l'interaction d'un système $\mathcal{A}$ avec un ensemble $\mathcal{R}$ d'oscillateurs harmoniques indépendants de fréquences $\omega_\lambda$ à l'équilibre thermique, ou réservoir, qui joue le rôle de l'environnement de $\mathcal{A}$. Dans le § 18.3.3, $\mathcal{A}$ sera un système à deux niveaux, et dans le § 18.3.4, une particule brownienne. Le hamiltonien complet $H_{AR}$ se décompose en $H_A$, le hamiltonien du système, $H_R$, le hamiltonien du réservoir et $W$, l'interaction système-réservoir

$$H_{AR} = H_A + H_R + W = H_T + W, \qquad H_T = H_A + H_R \tag{18.42}$$

avec

$$H_R = \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda a_\lambda^\dagger a_\lambda \tag{18.43}$$

Les fréquences $\omega_\lambda$ sont supposées former un continuum dans un grand intervalle de fréquences $\omega_* \sim 1/\tau_*$. En effet, un nombre fini de fréquences conduirait à des récurrences de Poincaré et il ne pourrait pas y avoir d'irréversibilité : il faut donc prendre la limite d'un nombre infini de fréquences. Lorsque $W = 0$, l'opérateur statistique du réservoir est donné par la distribution canonique

$$\rho_R(t=0) = \frac{\mathrm{e}^{-H_R/k_{\rm B}T}}{\mathrm{Tr}\,(\mathrm{e}^{-H_R/k_{\rm B}T})} \tag{18.44}$$

On déduit de cette expression les résultats standard pour les moyennes d'équilibre, notées $\langle\bullet\rangle$

$$\langle a_\lambda\rangle = \langle a_\lambda^\dagger\rangle = 0, \qquad \langle a_\lambda^\dagger a_\mu\rangle = n_\lambda\delta_{\lambda\mu}, \qquad \langle a_\lambda a_\mu^\dagger\rangle = (n_\lambda + 1)\delta_{\lambda\mu} \tag{18.45}$$

où le nombre d'occupation $n_\lambda$ est celui de la distribution de Bose-Einstein

$$n_\lambda = \frac{1}{\mathrm{e}^{\hbar\omega_\lambda/k_\mathrm{B}T} - 1} \tag{18.46}$$

L'interaction système-réservoir s'écrit plus précisément

$$W = AR, \qquad R = R^\dagger = \sum_\lambda (g_\lambda a_\lambda + g_\lambda^* a_\lambda^\dagger) \tag{18.47}$$

où $A = A^\dagger$ est un opérateur agissant dans $\mathcal{H}_A$. L'évolution de l'opérateur statistique est donnée dans le point de vue de Schrödinger par

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{AR}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[H_{AR}, \rho_{AR}] \tag{18.48}$$

Pour résoudre cette équation, il est utile de passer dans le point de vue de l'interaction[11]

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}_{AR}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[W(t), \tilde{\rho}_{AR}(t)] = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[A(t)R(t), \tilde{\rho}_{AR}(t)] \tag{18.49}$$

où les opérateurs $A(t)$ et $R(t)$ sont définis par

$$\begin{aligned} A(t) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_T t/\hbar}\, A\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_T t/\hbar} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_A t/\hbar}\, A\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_A t/\hbar}, \\ R(t) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_T t/\hbar}\, R\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_T t/\hbar} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_R t/\hbar}\, R\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_R t/\hbar} \\ &= \sum_\lambda \left( g_\lambda a_\lambda\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\lambda t} + g_\lambda a_\lambda^\dagger\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\lambda t} \right) \end{aligned} \tag{18.50}$$

car $H_R$ ($H_A$) n'agit pas sur les degrés de liberté de $\mathcal{A}$ ($\mathcal{R}$). Une fonction qui jouera un rôle crucial dans ce qui suit est la *fonction d'autocorrélation d'équilibre* $g(t')$ de $R(t)$

$$g(t') = \langle R(t)R(t-t')\rangle = \langle R(t')R(0)\rangle \tag{18.51}$$

En raison de l'invariance par translation de temps à l'équilibre, $\langle R(t_1)R(t_2)\rangle$ ne peut dépendre que de la différence $(t_1 - t_2)$, et de plus $g(t) = g^*(-t)$ parce que $R(t)$ est hermitien. La forme explicite de $g(t')$ se calcule à partir de (18.45) et (18.50)

$$g(t') = \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \Big[ n_\lambda \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\lambda t'} + (n_\lambda + 1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\lambda t'} \Big] \tag{18.52}$$

La fonction $g(t')$ est la somme d'un grand nombre d'exponentielles oscillant à des fréquences différentes, et ces exponentielles interfèrent destructivement pour $|t| \gtrsim \tau_*$. On s'attend donc à une décroissance exponentielle, contrôlée par un temps d'autocorrélation $\sim \tau_*$

$$|g(t')| \sim \mathrm{e}^{-|t'|/\tau_*} \tag{18.53}$$

11. Afin d'alléger les notations, nous écrivons $W(t)$ au lieu de $\tilde{W}(t)$, etc., car la dépendance par rapport à $t$ évite toute ambiguïté.

Revenons à (18.49), qu'il est commode de mettre sous forme intégrale

$$\tilde{\rho}_{AR}(t) = \rho_{AR}(0) - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\,\big[W(t'), \tilde{\rho}_{AR}(t')\big]$$

L'itération de cette équation donne

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_{AR}(t) = \rho_{AR}(0) &- \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\,\big[W(t'), \rho_{AR}(0)\big] \\ &- \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}t' \int_0^{t'} \mathrm{d}t''\,\big[W(t'), \big[W(t''), \tilde{\rho}_{AR}(t'')\big]\big]\end{aligned}$$

On différentie ensuite cette équation par rapport à $t$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}_{AR}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big[W(t), \rho_{AR}(0)\big] - \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}t'\big[W(t), [W(t'), \tilde{\rho}_{AR}(t')]\big] \tag{18.54}$$

Supposons que l'interaction $W$ soit branchée à $t = 0$ ; $\rho_{AR}(t = 0)$ possède alors une forme factorisée

$$\rho_{AR}(t = 0) = \rho(t = 0) \otimes \rho_R(t = 0) \tag{18.55}$$

Prenons dans (18.54) la trace sur les degrés de liberté du réservoir (exercice 18.4.5)

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{R}}\big[W(t), \rho_{AR}(0)\big] = \big[A(t), \rho_A(0)\big]\,\mathrm{Tr}_{\mathcal{R}}\big(R(t)\rho_R\big) = 0$$

où nous avons utilisé (18.45). Ceci donne une équation *exacte*, étant donné la condition initiale (18.55), pour l'opérateur statistique $\tilde{\rho}_A(t) \equiv \tilde{\rho}(t)$ du système $\mathcal{A}$

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}t'\,\mathrm{Tr}_{\mathcal{R}}\Big(\big[W(t), [W(t'), \tilde{\rho}_{AR}(t')]\big]\Big)} \tag{18.56}$$

### 18.3.2 Déduction de l'équation pilote

Le temps caractéristique d'évolution est *a priori* $\sim \hbar/|\mathcal{W}|$, où $\mathcal{W}$ est un élément de matrice typique de $W$. On ne peut pas se satisfaire de la théorie des perturbations, qui n'est valable que pour des temps $|\mathcal{W}|t/\hbar \ll 1$, alors que nous cherchons une théorie valable pour des temps longs. Deux points sont à souligner :

1. Nous pouvons espérer une factorisation approchée au temps $t$, *et pas seulement* à $t = 0$

$$\tilde{\rho}_{AR}(t) = \tilde{\rho}_A(t) \otimes \tilde{\rho}_R(t) + \delta\tilde{\rho}_{AR}(t)$$

$$\tilde{\rho}_A(t) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{R}}[\tilde{\rho}_{AR}(t)] \qquad \tilde{\rho}_R(t) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{A}}[\tilde{\rho}_{AR}(t)]$$

En effet, comme $\mathcal{R} \gg \mathcal{A}$ (le réservoir est beaucoup plus grand que le système), nous nous attendons à ce que

$$|\delta\tilde{\rho}_{AR}(t)|/|\tilde{\rho}_{AR}(t)| \ll 1$$

Ceci revient à ignorer la réaction du système sur le réservoir et conduit à des équations irréversibles pour le système.

2. Sur un temps $t \sim \tau_*$, les relations de phase entre $\mathcal{A}$ et $\mathcal{R}$ évoluent de $\sim |\mathcal{W}|\tau^*/\hbar$. Comme il y a perte de mémoire pour $t \gtrsim \tau_*$, une phase typique $\Phi$ effectue une marche au hasard, et pendant un temps $t \gg \tau_*$, elle effectue un nombre de pas $\sim t/\tau_*$ ; son écart quadratique moyen vaut
$$\Delta\Phi^2(t \gg \tau_*) \simeq \left(\frac{|\mathcal{W}|\tau_*}{\hbar}\right)^2 \times \frac{t}{\tau_*} = \frac{t}{\tau}$$

Lorsque $|\mathcal{W}|\tau_*/\hbar \ll 1$, on se trouve en présence de deux échelles de temps très différentes, une échelle de temps microscopique $\tau_*$ et une échelle de temps macroscopique $\tau$
$$\tau = \left(\frac{\hbar}{|\mathcal{W}|\tau_*}\right)^2 \tau_* \tag{18.57}$$
avec $\tau \gg \tau_*$. On peut alors procéder à la “granulation” (18.27) de $\tilde{\rho}$ sur un intervalle de temps $\Delta t$ choisi tel que $\tau_* \ll \Delta t \ll \tau$. La condition fondamentale de validité est l'inégalité
$$\boxed{\frac{|\mathcal{W}|\tau_*}{\hbar} \ll 1} \tag{18.58}$$
et si elle est vérifiée, on peut montrer rigoureusement[12] que

1. $$|\delta\tilde{\rho}_{AR}(t)| = O\left(\frac{|\mathcal{W}|\tau_*}{\hbar}\right)^2 = O\left(\frac{\tau_*}{\tau}\right) \tag{18.59}$$

2. $$\tilde{\rho}_R(t) = \rho_R(t=0) + O\left(\frac{|\mathcal{W}|\tau^*}{\hbar}\right)^2 = \rho_R(0) + O\left(\frac{\tau_*}{\tau}\right) \tag{18.60}$$

ce qui justifie la discussion qualitative donnée précédemment. En résumé, l'existence de deux échelles de temps très différentes, $\tau$ et $\tau_*$, avec $\tau \gg \tau_*$
$$\tau_* \ll \frac{\hbar}{|\mathcal{W}|} \ll \tau = \frac{\hbar^2}{|\mathcal{W}|^2\tau_*} \tag{18.61}$$
est la condition cruciale de validité de l'équation pilote pour la granulation de $\tilde{\rho}$ : rappelons que la dérivée par rapport au temps ne doit pas se comprendre comme $\lim_{\Delta t \to 0} \Delta\tilde{\rho}/\Delta t$, car la granulation lisse les variations de $\tilde{\rho}$ sur des

12. Cohen-Tannoudji *et al.* [1998], chapitre IV.

temps $\sim \tau_*$. On voit que le temps caractérisque naturel $\hbar/|\mathcal{W}|$ est très petit par rapport à $\tau$ : ce phénomène est appelé *rétrécissement par le mouvement* (motion narrowing), et il vient de ce que $\mathcal{A}$ est couplé à un grand nombre de modes indépendants. Compte tenu de (18.59) et (18.60), l'équation approchée pour $\tilde{\rho}$ est

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}t'\, \mathrm{Tr}_R\Big(\big[W(t),[W(t'),\tilde{\rho}_A(t')\otimes\rho_R(0)]\big]\Big)$$

En effectuant la trace sur les variables du réservoir, nous obtenons une équation du mouvement pour $\tilde{\rho}$ qui dépend seulement de $A$ et $g$ (exercise 18.4.6) :

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}t'\, g(t')\Big[A(t-t')\tilde{\rho}(t-t')A(t) - A(t)A(t-t')\tilde{\rho}(t-t') + \Big] + \text{h.c.}$$

où h.c.= terme conjugué hermitien, et nous avons effectué le changement de variable $t' \to t - t'$. Cette équation est encore une équation intégro-différentielle qui contient des effets de mémoire et pas une équation pilote. Pour obtenir une équation pilote, nous observons d'après (18.53) que les temps $t'$ qui contribuent de façon significative à l'intégrale sont bornés par $\tau_*$, $t' \lesssim \tau_*$. La différence $[\tilde{\rho}(t-t') - \tilde{\rho}(t)]$ est donc bornée par

$$|\tilde{\rho}(t-t') - \tilde{\rho}(t)| \lesssim O\left(\frac{|\mathcal{W}|\tau_*}{\hbar}\right)$$

et nous pouvons remplacer $\tilde{\rho}(t'-t)$ par $\tilde{\rho}(t)$ de manière cohérente avec les approximations précédentes : l'erreur commise est d'un ordre plus élevé dans le petit paramètre $\tau_*/\tau$. Prenant $t \gg \tau_*$, nous pouvons envoyer la borne supérieure de l'intégrale à l'infini et écrire

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}t'\, g(t')\Big[A(t-t')\tilde{\rho}(t)A(t) - A(t)A(t-t')\tilde{\rho}(t) + \Big] + \text{h.c.}$$

Ceci met un point final à notre justification de l'approximation markovienne car l'équation pour $\tilde{\rho}$ est maintenant locale en $t$ et ne dépend plus des conditions initiales. Il est commode (mais non indispensable) de revenir au point de vue de Schrödinger, où l'équation pilote pour $\rho$ s'écrit finalement

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H_A,\rho] + \frac{1}{\hbar^2}\big(E\rho A + A\rho\, E^\dagger - AE\rho - \rho E^\dagger A\big)} \tag{18.62}$$

l'opérateur $E$ étant donné par

$$\boxed{E = \int_0^\infty g(t')A(-t')\mathrm{d}t'} \tag{18.63}$$

Toutefois, les équations (18.62) et (18.63) ne suffisent pas pour assurer l'existence d'un sous-groupe dynamique. Il faut, en outre, pouvoir utiliser une approximation séculaire : voir (18.68) et l'exercice 18.4.8.

### 18.3.3 Relaxation d'un système à deux niveaux

Appliquons les résultats précédents au cas où le système $\mathcal{A}$ est un système à deux niveaux couplé à un bain thermique d'oscillateurs harmoniques indépendants : photons, phonons... Le hamiltonien libre $H_A$ du système à deux niveaux est maintenant $H_0$ (18.2)

$$H_A \equiv H_0 = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\,\sigma_z \tag{18.64}$$

et notre objectif est de comprendre ses propriétés de relaxation. L'interaction système-réservoir $W$ doit être capable d'induire des transitions entre les deux niveaux, et un choix possible est

$$W = \sigma_x R = \sigma_x \sum_\lambda \left( g_\lambda a_\lambda + g_\lambda^* a_\lambda^\dagger \right) \tag{18.65}$$

et par conséquent $A = \sigma_x = (\sigma_+ + \sigma_-)$. L'opérateur $E$ (18.63) agissant sur le système à deux niveaux est

$$E = \int_0^\infty g(t')A(-t')\mathrm{d}t' = G_+(\omega_0)\sigma_+ + G_-(\omega_0)\sigma_- \tag{18.66}$$

avec

$$G_\pm(\omega_0) = G_\mp(-\omega_0) = \int_0^\infty g(t')\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\omega_0 t'}\,\mathrm{d}t' \tag{18.67}$$

où nous avons utilisé (18.23). Reportant (18.66) dans (18.62) et utilisant $\sigma_+^2 = \sigma_-^2 = 0$, nous obtenons

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{i}}{2}\,\omega_0[\sigma_z,\rho] \\ &\quad + (G_+ + G_+^*)\sigma_+\rho\,\sigma_- - G_+\sigma_-\sigma_+\rho - G_+^*\rho\,\sigma_-\sigma_+ \\ &\quad + (G_- + G_-^*)\sigma_-\rho\,\sigma_+ - G_-\sigma_+\sigma_-\rho - G_-^*\rho\,\sigma_+\sigma_- \\ &\quad + (G_+ + G_-^*)\sigma_+\rho\,\sigma_+ + (G_- + G_+^*)\sigma_-\rho\,\sigma_-\end{aligned} \tag{18.68}$$

Utilisant l'invariance de la trace par permutation cyclique, nous pouvons vérifier que l'équation a été écrite de telle sorte que chacune des trois premières lignes est de trace nulle. La quatrième ligne ne contribue pas à l'évolution des populations (exercice 18.4.7), seulement à celle des cohérences. Mais même cette contribution aux cohérences peut être négligée à l'approximation séculaire, en utilisant le même argument que dans le § 5.3.2 : si nous revenons à $\mathrm{d}\tilde{\rho}/\mathrm{d}t$ et au point de vue de l'interaction, $\tilde{\sigma}_\pm(t) \sim \exp(\mp\mathrm{i}\omega_0 t)$, et le dernier terme de (18.67) varie comme $\exp(\mp 2\mathrm{i}\omega_0 t)$. Il oscille donc très rapidement contrairement aux autres termes et on peut supposer qu'il est nul en moyenne. Ceci est un résultat général : si les termes de relaxation sont écrits sous la forme

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}_{ij}}{\mathrm{d}t} = \sum_{k,l=0}^{1} \gamma_{ijkl}\tilde{\rho}_{kl}$$

on peut montrer que les coefficients $\gamma_{ijkl}$ peuvent être négligés si[13] $|\omega_{ij}-\omega_{kl}| \gg \Gamma$, $\hbar\omega_{ij} = E_i - E_j$. Cette approximation séculaire nous permet de justifier la forme des équations de Bloch (18.6) ; voir aussi l'exercice 18.4.8.

Calculons explicitement $G_\pm(\omega_0)$

$$\begin{aligned} G_+(\omega_0) &= \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \left( (n_\lambda + 1) \frac{\mathrm{i}}{\omega_0 - \omega_\lambda + \mathrm{i}\eta} + n_\lambda \frac{\mathrm{i}}{\omega_0 + \omega_\lambda + \mathrm{i}\eta} \right) \\ G_-(\omega_0) &= \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \left( n_\lambda \frac{-\mathrm{i}}{\omega_0 - \omega_\lambda - \mathrm{i}\eta} + (n_\lambda + 1) \frac{-\mathrm{i}}{\omega_0 + \omega_\lambda - \mathrm{i}\eta} \right) \end{aligned} \tag{18.69}$$

où $\eta \to 0^+$. Utilisant la formule classique

$$\frac{\mathrm{i}}{x \pm \mathrm{i}\eta} = \mathrm{i}\frac{\mathbb{P}}{x} \pm \pi\delta(x) \tag{18.70}$$

où $\mathbb{P}$ désigne une valeur principale de Cauchy, nous trouvons pour $G_+(\omega_0)$

$$\begin{aligned} G_+(\omega_0) &= \frac{1}{2}\,\Gamma_+ - \mathrm{i}\Delta_+, \\ \Gamma_+ &= 2\pi \sum_\lambda |g_\lambda|^2 (n_\lambda + 1)\delta(\omega_0 - \omega_\lambda), \\ \Delta_+ &= -\sum_\lambda |g_\lambda|^2 \left( (n_\lambda + 1) \frac{\mathbb{P}}{\omega_0 - \omega_\lambda} + n_\lambda \frac{\mathbb{P}}{\omega_0 + \omega_\lambda} \right) \end{aligned} \tag{18.71}$$

tandis que $G_-(\omega_0)$ est donné par

$$\begin{aligned} G_-(\omega_0) &= \frac{1}{2}\,\Gamma_- - \mathrm{i}\Delta_-, \\ \Gamma_- &= 2\pi \sum_\lambda |g_\lambda|^2 n_\lambda \delta(\omega_0 - \omega_\lambda), \\ \Delta_- &= -\sum_\lambda |g_\lambda|^2 \left( n_\lambda \frac{\mathbb{P}}{\omega_0 - \omega_\lambda} + (n_\lambda + 1) \frac{\mathbb{P}}{\omega_0 + \omega_\lambda} \right) \end{aligned} \tag{18.72}$$

En substituant les deux équations précédentes dans (18.68), en omettant la dernière ligne et en utilisant

$$\sigma_+\sigma_- = \frac{1}{2}\,(1 + \sigma_z), \qquad \sigma_-\sigma_+ = \frac{1}{2}\,(1 - \sigma_z),$$

nous obtenons une équation pilote sous la forme de Lindblad

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{i}}{2}\,(\omega_0 + \Delta)[\sigma_z, \rho] \\ &\quad + \frac{1}{2}\,\Gamma_+\big(2\sigma_+\rho\,\sigma_- - \{\sigma_-\sigma_+, \rho\}\big) \\ &\quad + \frac{1}{2}\,\Gamma_-\big(2\sigma_-\rho\,\sigma_+ - \{\sigma_+\sigma_-, \rho\}\big) \end{aligned} \tag{18.73}$$

13. Voir Cohen-Tannoudji *et al.* [1998], Chap. IV, pour une discussion détaillée.

Soulignons que la forme de Lindblad ne peut être obtenue que si l'on effectue l'approximation séculaire, qui est valable à condition que la fréquence caractérisique $\omega_0$ du système libre soit très grande par rapport au taux de relaxation $\Gamma$ : $\omega_0 \gg \Gamma$. Cette condition est bien vérifiée en optique quantique où $\omega_0 \sim 10^{15}\,\mathrm{rad.s}^{-1}$ et $\Gamma \sim 10^9\,\mathrm{rad.s}^{-1}$. En d'autres termes, la dynamique cohérente du système doit être rapide par rapport à celle de sa relaxation, et le système effectue un grand nombre de cycles pendant le temps de relaxation. Dans ces conditions, et si le spectre de $H_A$ est non dégénéré, on peut montrer que les populations obéissent à un système fermé d'équations différentielles, les équations de Pauli (exercice 18.4.8, question **3**).

Les deux opérateurs de saut quantique de l'équation de Lindblad sont

$$L_+ = \sqrt{\frac{\Gamma_+}{2}}\,\sigma_+ \ , \qquad L_- = \sqrt{\frac{\Gamma_-}{2}}\,\sigma_- \tag{18.74}$$

Le déplacement d'énergie $\Delta$ (ou déplacement Lamb)

$$\Delta = \Delta_- - \Delta_+ = \sum_\lambda |g_\lambda|^2(2n_\lambda + 1)\left(\frac{\mathbb{P}}{\omega_0 - \omega_\lambda} + \frac{\mathbb{P}}{\omega_0 + \omega_\lambda}\right) \tag{18.75}$$

représente les corrections radiatives à la différence d'énergie $\hbar\omega_0$ entre les deux niveaux provenant de l'interaction du système à deux niveaux avec le bain thermique d'oscillateurs.

L'équation (18.73) généralise (18.22) obtenue à $T = 0$, où seule l'émission spontanée avait été prise en compte, et le déplacement Lamb ne pouvait pas être calculé. À température non nulle, on doit aussi prendre en compte l'absorption de photons : le taux de relaxation $\Gamma_+$ décrit les transitions $|1\rangle \to |0\rangle$ et $\Gamma_-$ les transitions $|0\rangle \to |1\rangle$ (figure 18.2). Il est facile de vérifier (exercice 18.4.7) que $\Gamma = \Gamma_+ + \Gamma_-$ est le taux de relaxation des populations, tandis que celui des cohérences est $\Gamma/2$ : la relation $T_2 = 2T_1$ est aussi valable à température non nulle. Dans le même exercice, on montre qu'à la limite des temps longs, les populations des niveaux $|0\rangle$ and $|1\rangle$ sont donnés par la loi de Boltzmann (1.12), avec une température $T$ égale à celle du bain thermique. Ceci confirme la cohérence de notre approche, car ce résultat montre que le système est en équilibre avec le bain thermique dans la limite des temps longs. La largeur totale $\Gamma$ est donnée explicitement par

$$\Gamma = \Gamma_+ + \Gamma_- = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_\lambda |g_\lambda|^2(2n_\lambda + 1)\delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_\lambda) \tag{18.76}$$

Ceci est une vérification intéressante du calcul, car (18.76) peut être écrit sous la forme de la règle d'or de Fermi (8.152) :

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar}|g(\omega_0)|^2(2n_0 + 1)\mathcal{D}(\hbar\omega_0)$$

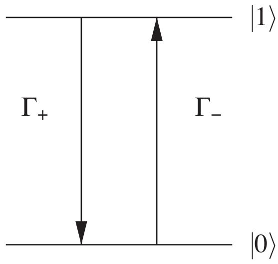



FIG. 18.2 – Taux de transition $\Gamma_+$ and $\Gamma_-$.

où $\mathcal{D}(\hbar\omega_0)$ est la densité d'états du réservoir. Le rapport $\Gamma_+/\Gamma_-$ est donné par la loi de Boltzmann

$$\frac{\Gamma_+}{\Gamma_-} = \mathrm{e}^{\hbar\omega/k_\mathrm{B}T}$$

L'équation pilote (18.73) nous permet d'écrire par inspection (en se souvenant de la correspondance $a \to \sigma_+$, $a^\dagger \to \sigma_-$ ; voir la note 7) la généralisation à $T \neq 0$ de (18.36), qui donne l'équation pilote pour un oscillateur harmonique couplé au champ électromagnétique quantifié à température non nulle

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[H_0, \rho] + \frac{1}{2}\,\Gamma_+\big[2a\rho a^\dagger - \{a^\dagger a, \rho\}\big] + \frac{1}{2}\,\Gamma_-\big[2a^\dagger\rho a - \{aa^\dagger, \rho\}\big] \quad (18.77)$$

Des démonstrations détaillées de cette équation se trouvent dans des livres d'optique quantique cités dans la bibliographie.

### 18.3.4 Mouvement brownien quantique

Notre dernier exemple sera celui d'une particule de masse $M$, couplée à un bain thermique d'oscillateurs harmoniques indépendants de masses $m_\lambda$ et de fréquences $\omega_\lambda$. Ceci est un cas typique de mouvement brownien, où une particule lourde interagit avec des particules légères (molécules) d'un bain thermique, et où l'on peut identifier deux échelles de temps très différentes : l'échelle de temps $\tau_*$ typique du bain et l'échelle de temps $\tau$ typique du mouvement de la particule lourde, avec $\tau_* \ll \tau$. Caldeira et Leggett [1983] ont proposé un modèle spécifique pour $\mathcal{A}$ et $\mathcal{AR}$, où $\mathcal{A}$ est une particule quantique libre[14] se déplaçant dans un espace à une dimension, une simplification qui n'affecte pas la physique

$$H_{AR} = \frac{P^2}{2M} + \sum_\lambda \frac{P_\lambda^2}{2m_\lambda} + \frac{1}{2}\sum_\lambda m_\lambda\omega_\lambda^2(X - X_\lambda)^2 \quad (18.78)$$

14. On peut aussi mettre la particule dans un potentiel $U(X)$, par exemple un potentiel harmonique $M\Omega^2X^2/2$, voir (18.97).

$(P,\, P_\lambda)$ et $(X,\, X_\lambda)$ sont les opérateurs impulsion et position de la particule et des oscillateurs. Les différents hamiltoniens sont

$$\begin{aligned}
H_A &= \frac{P^2}{2M}, \\
H_R &= \sum_\lambda \left( \frac{P_\lambda^2}{2m_\lambda} + \frac{1}{2}\,\omega_\lambda^2\, X_\lambda^2 \right) = \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda a_\lambda^\dagger a_\lambda \\
V &= \frac{1}{2}\,\kappa X^2 + XR = H_{\rm CT} + X\Big[ -\sum_\lambda g_\lambda \Big(a_\lambda + a_\lambda^\dagger\Big)\Big]
\end{aligned} \tag{18.79}$$

où les coefficients $g_\lambda$ et $\kappa$ valent

$$g_\lambda = \sqrt{\hbar m_\lambda \omega_\lambda^3/2} \qquad\qquad \kappa = \sum_\lambda m_\lambda \omega_\lambda^2 \tag{18.80}$$

$A$ est ici l'opérateur position $X$ de la particule brownienne, et CT désigne un "contre-terme", ainsi appelé pour des raisons qui seront explicitées ci-dessous ; nous avons négligé l'énergie de point zéro des oscillateurs. Il semble que l'invariance par translation ait été brisée dans (18.79), mais ceci est bien sûr un artefact de la décomposition : ainsi que nous le verrons ultérieurement, la contribution du contre-terme non invariant par translation

$$H_{\rm CT} = \frac{1}{2}\,\kappa X^2 \tag{18.81}$$

compense exactement une autre contribution provenant de l'interaction, d'où la dénomination "contre-terme". La situation ressemble superficiellement à celle étudiée dans le § 18.3.3, mais il y a une différence importante. Dans le cas de l'optique quantique, le temps de relaxation $1/\Gamma = \tau$ doit être grand par rapport au temps d'évolution cohérente de $\mathcal{A}$ : $\tau \gg |\omega - \omega'|^{-1} = \tau_A$, où $\omega$ et $\omega'$ sont deux fréquences de Bohr typiques (exercice 18.4.8). La condition de validité de l'équation pilote pour le mouvement brownien est au contraire $\tau_A \gg \tau_*$, où par exemple $\tau_A \sim \Omega^{-1}$ si la particule est soumise à un potentiel harmonique $M\Omega^2 X^2/2$ : le temps typique de l'évolution cohérente doit être grand par rapport à la fréquence typique du réservoir. Ces conditions de validité sont résumées ci-dessous

$$\begin{aligned}
\text{optique quantique} &: \quad \tau_* \ll \tau,\ \tau_A \ll \tau \\
\text{mouvement brownien} &: \tau_* \ll \tau,\, \tau_* \ll \tau_A
\end{aligned}$$

Il est commode pour des calculs analytiques simples (mais pas indispensable en principe) de prendre une limite haute température, où

$$n_\lambda \simeq n_\lambda + 1 \simeq \frac{k_{\rm B}T}{\hbar\omega_\lambda} \gg 1$$

Nous rappelons que les fréquences $\omega_\lambda$ sont très resserrées sur un intervalle $\sim 1/\tau_*$, et les sommes sur $\lambda$ peuvent être remplacées par des intégrales. Les

résultats s'expriment en terme de la fonction spectrale $J(\omega)$

$$J(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \delta(\omega - \omega_\lambda) = \frac{\pi}{2} \sum_\lambda m_\lambda \omega_\lambda^3 \delta(\omega - \omega_\lambda) \tag{18.82}$$

Nous déduisons de (18.52) et (18.82) les expressions de la partie réelle $C(t')$ et de la partie imaginaire $\chi(t')$ de la fonction d'autocorrélation $g(t')$ :

$$\begin{aligned} C(t') &= \frac{2k_\mathrm{B}T}{\pi} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}\, J(\omega) \cos \omega t', \\ \chi(t') &= \frac{2\theta(t')}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}\omega\; J(\omega) \sin \omega t' = -\frac{\theta(t')}{k_\mathrm{B}T} \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t'} \end{aligned} \tag{18.83}$$

Il nous faut maintenant choisir une forme spécifique de la fonction spectrale $J(\omega)$. La fréquence caractéristique typique pour $J(\omega)$ étant $\omega_* = 1/\tau_*$, nous choisissons une fonction $J(\omega)$ s'annulant pour $\omega \gg \omega_*$ : $\omega_*$ joue le rôle d'un cut-off en fréquence. La forme la plus commode pour les calculs analytiques est celle de Caldeira and Leggett [1983]

$$J(\omega) = M\gamma\omega\theta(\omega_* - \omega) \tag{18.84}$$

L'analyse dimensionnelle montre que $\gamma$ a les dimensions d'une fréquence, et donc d'un coefficient de viscosité, comme dans $\dot{v} = -\gamma v$. Le choix $J(\omega) \propto \omega$ assure que le coefficient de viscosité est indépendant de la fréquence. Nous nous attendons à ce que les résultats ne dépendent pas qualitativement de la forme précise de $J(\omega)$, la seule caractéristique importante étant l'existence d'un cut-off en fréquence $\omega_*$. Dans l'exercice 18.4.10, on montre que des résultats équivalents sont obtenus en utilisant

$$J(\omega) = M\gamma\,\omega \left( \frac{\omega_*^2}{\omega^2 + \omega_*^2} \right) \tag{18.85}$$

On peut relier $\gamma$ à un coefficient de diffusion $D$ dans l'espace des impulsions grâce à la relation d'Einstein (15.75) $D = M\gamma k_\mathrm{B}T$. Avec le choix (18.84), $C(t')$ a une forme analytique simple

$$C(t') = 2k_\mathrm{B}TM\gamma \,\frac{\sin \omega_* t'}{\pi t'} \tag{18.86}$$

La fonction $\sin \omega_* t'/\pi t'$ exhibe un pic de hauteur $\omega_*/M$ et de largeur $\sim 1/\omega_* = \tau_*$ à $t' = 0$, et elle devient une fonction delta dans la limite $\omega_* \to \infty$. Nous appellerons $\delta_*(t')$ une “fonction delta étalée” sur un intervalle de largeur de largeur $\sim \tau_*$, et écrirons $g(t)$ comme

$$g(t) = 2D\delta_*(t) + \mathrm{i}\hbar\omega\delta_*'(t) \tag{18.87}$$

Après ces préliminaires, nous sommes maintenant prêts à donner la forme de l'équation pilote (18.62), qui devient dans le cas présent

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{P^2}{2M}, \rho\right] - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{1}{2}\kappa X^2, \rho\right] - \frac{1}{\hbar^2}\left(E\rho\, X + X\rho\, E^\dagger - XE\rho - \rho E^\dagger X\right) \tag{18.88}$$

avec

$$E = \int_0^\infty g(t')X(-t')\mathrm{d}t' \tag{18.89}$$

L'opérateur $X(t)$ est donné dans le point de vue de l'interaction par

$$X(t') = \exp\left[\frac{\mathrm{i}P^2t'}{2M\hbar}\right] X \exp\left[-\frac{\mathrm{i}P^2t'}{2M\hbar}\right] = X + \frac{Pt'}{M} \tag{18.90}$$

un résultat que l'on déduit immédiatement de (7.67) si la dynamique est celle d'une particule libre. Les termes proportionnels à $D$ dans le membre de droite de l'équation pilote font intervenir l'intégrale

$$\begin{aligned}\frac{2D}{\hbar^2}\int_0^\infty \delta_*(t') \,\Bigg[\, &\left(X - \frac{Pt'}{M}\right)\rho(t)X + X\rho(t)\left(X - \frac{Pt'}{M}\right) \\ &- X\left(X - \frac{Pt'}{M}\right)\rho(t) - \rho(t)\left(X - \frac{Pt'}{M}\right)X\Bigg]\mathrm{d}t'\end{aligned}$$

En raison de la largeur étroite de la fonction $\delta_*(t')$, les termes proportionnels à $Pt'/M$ sont négligeables, et il nous reste le double commutateur

$$-\frac{D}{\hbar^2}\big[X, \big[X, \rho(t)\big]\big] \tag{18.91}$$

Le terme proportionnel à $M\gamma$ est

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{i}M\gamma}{\hbar}\int_0^\infty \delta'_*(t')\Bigg[&\left(X - \frac{Pt'}{M}\right)\rho(t)X + X\rho(t)\left(X - \frac{Pt'}{M}\right) \\ &- X\left(X - \frac{Pt'}{M}\right)\rho(t) - \rho(t)\left(X - \frac{Pt'}{M}\right)X\Bigg]\mathrm{d}t'\end{aligned} \tag{18.92}$$

Les deux intégrales dont nous avons besoin sont

$$\begin{aligned}&\text{(i)} \qquad \int_0^\infty \delta'_*(t')t'\,\mathrm{d}t' = -\frac{1}{2} \\ &\text{(ii)} \qquad \int_0^\infty \delta'_*(t')\mathrm{d}t' = \int_0^\infty \mathrm{d}t'\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}\left(\frac{\sin\omega_* t'}{\pi t'}\right) = -\frac{\omega_*}{\pi}\end{aligned} \tag{18.93}$$

L'équation (18.92) peut être écrite comme la somme de deux termes. Le premier, qui dépend de (i), est

$$\frac{\gamma}{2\mathrm{i}\hbar}\big[X, \{P, \rho(t)\}\big] \tag{18.94}$$

et le second, qui dépend de (ii) est

$$\frac{\mathrm{i}M\gamma\omega_*}{\pi\hbar}\big[X^2, \rho(t)\big] = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{1}{2}\,\kappa X^2, \rho(t)\right] \tag{18.95}$$

car dans le modèle de Caldeira-Leggett, $\kappa$ est donné par

$$\kappa = \sum_\lambda m_\lambda \omega_\lambda^2 = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}\, J(\omega) = \frac{2M\gamma\omega_*}{\pi}$$

Dans ces conditions, la contribution de $H_{\mathrm{CT}}$ (18.81) à l'évolution de l'opérateur statistique compense exactement (18.95). Il suffit maintenant de reporter (18.91) et (18.94) dans (18.88) pour obtenir le résultat final, qui est une équation pilote pour une particule brownienne quantique

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{P^2}{2M}, \rho(t)\right] - \frac{\mathrm{i}\gamma}{2\hbar}\big[X, \{P, \rho(t)\}\big] - \frac{D}{\hbar^2}\big[X, [X, \rho(t)]\big]} \tag{18.96}$$

L'équation (18.96) est un résultat fondamental de la théorie des systèmes quantiques ouverts. On observe que cette équation n'est pas du type de Lindblad ; on peut néanmoins montrer qu'elle préserve la positivité de $\rho$ et se ramène à une équation de Lindblad en ajoutant des termes négligeables dans une limite de haute température[15]. Les trois termes du membre de gauche de (18.96) s'interprètent comme suit :

1. Le premier terme est un terme d'évolution libre, $(-\mathrm{i}/\hbar)[H_A, \rho(t)]$.
2. Le deuxième terme est un terme de frottement.
3. Le troisième terme correspond à une diffusion, et c'est ce terme qui conduit à la décohérence.

Il est possible de déterminer la solution du modèle de Caldeira-Leggett lorsque la particule est soumise à un potentiel harmonique $M\Omega^2 X^2/2$. On peut en fait écrire une solution exacte[16] au temps $t$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = &-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{P^2}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^2(t)X^2, \rho(t)\right] - \frac{\mathrm{i}\gamma(t)}{2\hbar}\big[X, \{P, \rho(t)\}\big]\\ &- \frac{D(t)}{\hbar^2}\big[X, [X, \rho(t)]\big] - \frac{f(t)}{\hbar}\big[X, [P, \rho]\big]\end{aligned} \tag{18.97}$$

Le dernier terme est appelé terme de diffusion anormale, qui est négligeable dans la limite des temps longs. Les fonctions $\Omega(t)$, $D(t)$, $\gamma(t)$ et $f(t)$ s'expriment sous forme d'intégrales que l'on doit en général calculer numériquement, sauf lorsque $t \to \infty$, auquel cas une expression analytique est parfois disponible.

15. Breuer et Petruccione [2002], chapitre 4.

16. Le problème étant linéaire (les équations du mouvement sont linéaires), il n'est pas surprenant que l'on sache écrire une solution exacte qui s'obtient par des méthodes d'intégrale de chemin.

### 18.3.5 Décohérence d'un paquet d'ondes

Supposons que nous partions d'une superposition de deux paquets d'ondes gaussiens centrés à $x = \pm a$ et de largeur $\sigma \ll a$

$$\varphi(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \left(\exp\Big[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\Big] + \exp\Big[-\frac{(x+a)^2}{2\sigma^2}\Big]\right) \tag{18.98}$$

La transformée de Fourier donne la distribution de probabilité en impulsion

$$|\tilde{\varphi}(p)|^2 = \frac{2\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2}\right) \cos^2 \frac{pa}{\hbar} \tag{18.99}$$

On observe des oscillations rapides de période $\pi\hbar/a \ll \hbar/\sigma$ à l'intérieur d'une enveloppe gaussienne, en raison de la cohérence des deux paquets d'ondes. Avant d'exploiter (18.96), donnons une explication qualitative de la décohérence. La particule brownienne subit un grand nombre de collisions avec les particules légères (molécules) dans le bain thermique. En raison de ces collisions, la particule brownienne effectue une marche au hasard dans l'espace des impulsions[17] avec un coefficient de diffusion $D$ (15.75), et la dispersion en impulsion $\Delta p$ est donnée par

$$\Delta p^2 = 2Dt \tag{18.100}$$

Chacun des pics dans $|\tilde{\varphi}(p)|^2$ s'élargit sous l'effet des collisions, et ces pics vont être complètement brouillés au bout d'un temps $\tau_{\rm dec}$ que l'on évalue à partir de (18.100)

$$\Delta p^2 \sim \left(\frac{\pi\hbar}{a}\right)^2 = 2D\tau_{\rm dec},$$

ou encore

$$\tau_{\rm dec} \sim \frac{\hbar^2}{Da^2} \tag{18.101}$$

Pour étudier quantitativement l'évolution du paquet d'ondes, on se reporte à (18.96), en utilisant le fait que les temps courts sont dominés par la diffusion

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle x|\rho(t)|x'\rangle \simeq -\frac{D}{\hbar^2}(x-x')^2\langle x|\rho(t)|x'\rangle$$

Le temps de décohérence se lit directement sur cette équation

$$\boxed{\tau_{\rm dec} \simeq \frac{\hbar^2}{4Da^2} \sim \frac{1}{\gamma}\left(\frac{\lambda_T}{a}\right)^2} \tag{18.102}$$

Le coefficient de diffusion est $D = M\gamma k_{\rm B}T$ (15.75) et $\lambda_T$ est la longueur d'onde thermique (14.87)

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi M k_{\rm B} T}}$$

17. Que l'on ne doit pas confondre avec une diffusion dans l'espace des positions !

La figure 18.3 montre l'évolution de la matrice statistique : à $t = 0$, on observe des pics à $x = \pm a$ et $x' = \pm a$, mais pour $t \gg \tau_{\rm dec}$, les pics à $\{x = a, x' = -a\}$ et $\{x = -a, x' = a\}$ ont disparu. Il reste un mélange statistique de deux paquets d'ondes : la décohérence a "transformé" la superposition linéaire en mélange incohérent[18]. Les états propres de l'opérateur position $X$ ne s'intriquent pas avec l'environnement : ce sont des états pointeurs.

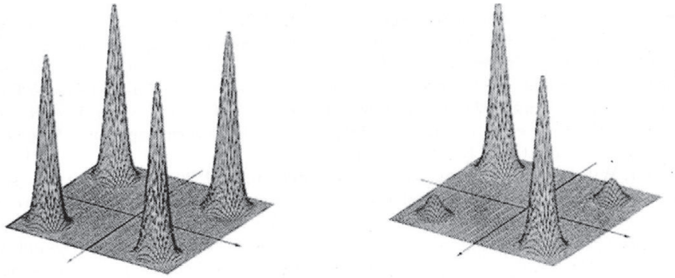


FIG. 18.3 – Évolution temporelle de la matrice statistique pour la superposition de deux paquets d'ondes. Figure de gauche : $t = 0$. Figure de droite : $t \gg \tau_{\rm dec}$. D'après Zurek [1991], reproduit avec l'aimable autorisation de W. Zurek.

L'expérience d'interférences avec des molécules lourdes (§ 17.3.5) illustre cette décohérence : on constate sur la figure 17.6 (partie supérieure) que les interférences sont de plus en plus brouillées quand la pression du gaz résiduel augmente. Les molécules lourdes effectuent une marche brownienne dans le gaz, et les paquets d'ondes émis par les deux fentes d'Young perdent leur cohérence.

## 18.4 Exercices

### 18.4.1 La transposition n'est pas complètement positive

Soit $\mathcal{H}_A$ et $\mathcal{H}_B$, deux espaces de Hilbert de dimension $d$. Considérons l'état intriqué de façon maximale

$$|\varphi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^{N} |m_A \otimes m'_B\rangle$$

et l'opérateur statistique correspondant $\rho_{AB} = |\varphi_{AB}\rangle\langle\varphi_{AB}|$. L'opérateur de transposition $\mathcal{T}_A$ dans $\mathcal{H}_A$ est défini par son action sur $\rho_{AB}$ :

$$(\mathcal{T}_A \otimes I_B)\rho_{AB} = \rho'_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{m,n} (|n\rangle\langle m|)_A \otimes (|m'\rangle\langle n'|)_B$$

18. Les guillemets rappellent qu'il s'agit d'un mélange impropre, voir la discussion du § 11.1.4.

Si l'on définit $\mathcal{N} = N\rho'_{AB}$, montrer que l'application de $\mathcal{N}$ sur un vecteur $|\varphi_A \otimes \psi_B\rangle$ a pour résultat

$$\mathcal{N}|\varphi_A \otimes \psi_B\rangle = |\psi_A \otimes \varphi_B\rangle$$

Montrer que $\mathcal{N}^2 = 1$. Écrire la forme explicite de $\mathcal{N}$ dans le cas $d = 2$ : la matrice correspondante est appelée “matrice SWAP”. Montrer, d'abord dans le cas $d = 2$ et ensuite dans le cas général, que $\mathcal{N}$ doit avoir des valeurs propres négatives.

### 18.4.2 Représentation de Kraus pour le modèle d'émission spontanée

**1.** On reprend le modèle pour l'émission spontanée du § 11.4.3, la loi pour les sauts quantiques étant

$$\begin{aligned} U_{AE}|0_A \otimes 0_E\rangle &= |0_A \otimes 0_E\rangle, \\ U_{AE}|1_A \otimes 0_E\rangle &= \sqrt{1-\mathsf{p}}\ |1_A \otimes 0_E\rangle + \sqrt{\mathsf{p}}\ |0_A \otimes 1_E\rangle \end{aligned}$$

Écrire les opérateurs de Kraus $M_0$ et $M_1$, en déduire $\mathcal{K}(\rho)$ et retrouver la loi d'évolution (11.87) pour les populations et les cohérences.

**2.** Partant de (18.15), utiliser la méthode du § 11.4.3 pour obtenir directement $\mathcal{K}(\rho)$.

### 18.4.3 Modèle de dépolarisation

Dans cet exercice, $\mathcal{H}_E$ est de dimension 4 et une base orthonormée est formée par un état de référence $|0_E\rangle$ et trois états $|i_E\rangle$, $i = 1,\ 2,\ 3$ ; $\mathcal{H}_A$ est de dimension 2. La loi pour les sauts quantiques est définie par

$$U_{AE}|\varphi_A \otimes 0_E\rangle = \sqrt{1-\mathsf{p}}\ |\varphi_A \otimes 0_E\rangle + \sqrt{\frac{\mathsf{p}}{3}}\ \Big[\sum_{i=1}^{3}(\sigma_{iA} \otimes I_E)|\varphi_A \otimes i_E\rangle\Big]$$

Montrer que les opérateurs de Kraus sont

$$M_0 = \sqrt{1-\mathsf{p}}\ I, \qquad M_i = \sqrt{\frac{\mathsf{p}}{3}}\ \sigma_i$$

Vérifier $\sum_\mu M_\mu^\dagger M_\mu = I$ et calculer $\mathcal{K}(\rho)$. Montrer que l'évolution peut s'écrire en fonction du vecteur de Bloch : si

$$\rho = \frac{1}{2}\left(I + \vec{\sigma} \cdot \vec{b}\right)$$

alors

$$\mathcal{K}(\rho) = \frac{1}{2}\left(I + \vec{\sigma} \cdot \vec{b}'\right) \qquad \vec{b}' = \left(1 - \frac{4\mathsf{p}}{3}\right)\vec{b}$$

Pourquoi peut-on parler de modèle pour la dépolarisation ?

### 18.4.4 Amortissements de phase et d'amplitude

**1.** Examinons le modèle suivant d'amortissement simultané de phase et d'amplitude pour un système à deux niveaux. Les trois opérateurs de Kraus sont donnés par

$$M_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\lambda-\gamma} \end{pmatrix} \qquad M_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\gamma} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad M_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda} \end{pmatrix}$$

Vérifier que

$$\sum_{\mu=0}^{2} M_\mu^\dagger M_\mu = I$$

Quelles sont les restrictions sur $\lambda$ et $\gamma$ ?

**2.** Montrer que l'opérateur statistique transformé $\mathcal{K}[\rho]$ est

$$\begin{pmatrix} \rho_{00} + \gamma\rho_{11} & \rho_{01}\sqrt{1-\lambda-\gamma} \\ \rho_{10}\sqrt{1-\lambda-\gamma} & \rho_{11}(1-\gamma) \end{pmatrix}$$

**3.** Quel est le résultat après $n$ itérations de l'opérateur de Kraus ? Posant

$$\gamma = \frac{\Gamma t}{n}, \qquad \lambda = \frac{\Lambda t}{n}, \qquad n \gg 1$$

montrer que

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} 1 - \rho_{11}\mathrm{e}^{-\Gamma t} & \rho_{01}\mathrm{e}^{-(\Lambda+\Gamma)t/2} \\ \rho_{10}\mathrm{e}^{-(\Lambda+\Gamma)t/2} & \rho_{11}\mathrm{e}^{-\Gamma t} \end{pmatrix}$$

Quels sont les temps de relaxation $T_1$ and $T_2$ ? Vérifier que $T_2 \le 2T_1$.

### 18.4.5 Détails de la preuve de l'équation pilote

**1.** Vérifier que si $\rho_{AR}(0) = \rho_A(0) \otimes \rho_R(0)$, alors

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{R}}\big[W(t), \rho_{AR}(0\big] = \big[A(t), \rho_A(0)]\mathrm{Tr}\,(R(t)\rho_R(0)) = 0.$$

**2.** Compléter les détails du calcul conduisant à (18.62). Suggestion

$$g(t-t') = \mathrm{Tr}\,[R(t)R(t')\rho_R(0)] = \mathrm{Tr}\,[R(t')\rho_R(0)R(t)]$$

Pour le passage du point de vue de l'interaction à celui de Schrödinger, utiliser

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H_A, \rho] + \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_A t/\hbar}\,\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_A t/\hbar}$$

### 18.4.6 Superposition d'états cohérents

Nous nous proposons d'étudier la décohérence d'une superposition de deux états cohérents dans le modèle d'oscillateur harmonique amorti du § 17.2.3. L'évolution temporelle de l'opérateur statistique est donné par (18.36) :

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[H_0, \rho] + \frac{1}{2}\,\Gamma\Big[2a\rho a^\dagger - \{a^\dagger a, \rho\}\Big]$$

Dans cet exercice, il est instructif de conserver la partie $H_0$ de l'évolution.

**1.** Considérons deux états propres $|n\rangle$ du hamiltonien libre $H_0 = \omega_0 a^\dagger a$, et soit $\rho_{nm}$, les éléments de matrice $\langle n|\rho|m\rangle$ de $\rho$. Montrer que les éléments de matrice diagonaux $\rho_{nn}$ obéissent à

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{nn}}{\mathrm{d}t} = -n\Gamma\rho_{nn} + (n+1)\Gamma\rho_{n+1,n+1}$$

Donner l'interprétation physique des deux termes de cette équation. Donner des arguments permettant d'interpréter $\Gamma$ comme le taux d'émission d'un photon (ou d'un phonon). Quelle est l'équation d'évolution des cohérences $\rho_{n+1,n}$ ?

**2.** Introduisons la fonction $C(\lambda, \lambda^*; t)$ par

$$C(\lambda, \lambda^*; t) = \mathrm{Tr}\left(\rho\,\mathrm{e}^{\lambda a^\dagger}\,\mathrm{e}^{-\lambda^* a}\right)$$

Montrer que les dérivées partielles par rapport à $\lambda$ ont l'effet suivant à l'intérieur de la trace

$$\frac{\partial}{\partial\lambda} \to \rho\, a^\dagger, \qquad \left(\frac{\partial}{\partial\lambda} - \lambda^*\right) \to a^\dagger\,\rho$$

Suggestion : utiliser l'identité (2.72) pour commuter $\exp(\lambda a^\dagger)$ et $\exp(-\lambda^* a)$. Quelles sont les identités correspondantes pour $\partial/\partial\lambda^*$ ?

**3.** Montrer que $C(\lambda, \lambda^*; t)$ obéit à l'équation aux dérivées partielles

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \left(\frac{\Gamma}{2} - \mathrm{i}\omega_0\right)\frac{\partial}{\partial \ln\lambda} + \left(\frac{\Gamma}{2} + \mathrm{i}\omega_0\right)\frac{\partial}{\partial \ln\lambda^*}\right] C(\lambda, \lambda^*; t) = 0$$

Cette équation se résout par la méthode des caractéristiques. La solution est (à démontrer ou à vérifier)

$$C(\lambda, \lambda^*; t) = C_0\big(\lambda\exp[-(\Gamma/2 - \mathrm{i}\omega_0)t], \lambda^*\exp[-(\Gamma/2 + \mathrm{i}\omega_0)t]\big)$$

avec

$$C(\lambda, \lambda^*; t = 0) = C_0(\lambda, \lambda^*)$$

**4.** Supposons que l'état initial à $t = 0$ soit un état cohérent $|z\rangle$

$$|z\rangle = \mathrm{e}^{-|z|^2/2}\,\mathrm{e}^{za^\dagger}|0\rangle$$

Montrer que dans ce cas

$$C_0 = \exp(\lambda z^* - \lambda^* z),$$

et que cet état est devenu au temps $t$ l'état cohérent $|z(t)\rangle$ avec

$$z(t) = z\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\, \mathrm{e}^{-\Gamma t/2}.$$

En conséquence, un état cohérent reste un état cohérent quand $\Gamma \neq 0$ (comparer avec (10.38)), mais $|z(t)| \to 0$ pour $t \gg 1/\Gamma$. Dans le plan complexe, $z(t)$ décroît en spirale vers l'origine. Comme $\Gamma \ll \omega_0$, on observe un grand nombre de tours autour de l'origine.

**5.** Considérons maintenant une superposition de deux états cohérents à $t = 0$ :

$$|\Phi\rangle = c_1|z_1\rangle + c_2|z_2\rangle$$

Montrer qu'à $t = 0$

$$C_{12}(t=0) = \mathrm{Tr}\,\left(|z_1\rangle\langle z_2|\mathrm{e}^{\lambda a^\dagger}\mathrm{e}^{-\lambda^* a}\right) = \langle z_2|z_1\rangle \mathrm{e}^{\lambda z_2^*}\mathrm{e}^{-\lambda^* z_1}$$

Quelle est l'interprétation de $C_{12}(t)$ ? Définissons

$$\eta(t) = \frac{\langle z_2|z_1\rangle}{\langle z_2(t)|z_1(t)\rangle}$$

et écrivons $C_{12}(t)$ sous la forme

$$C_{12}(t) = \eta(t)\langle z_2(t)|z_1(t)\rangle\, \mathrm{e}^{\lambda z_2^*(t)}\, \mathrm{e}^{-\lambda^* z_1(t)}$$

Montrer que

$$|\eta(t)| = \exp\left[-\frac{1}{2}|z_1 - z_2|^2\left(1 - \mathrm{e}^{-\gamma t}\right)\right] \simeq \exp\left[-\frac{\Gamma}{2}|z_1 - z_2|^2\right]$$

où la dernière expression est valable pour $\Gamma t \ll 1$. Le temps de décohérence est donc

$$\tau_{\mathrm{dec}} = \frac{2}{\Gamma|z_1 - z_2|^2}$$

**6.** Choisissons $z_1 = 0$ (état fondamental de l'oscillateur) et $z_2 = z$. D'après la question **1**, le temps moyen pour l'émission *d'un* photon est $\sim (\Gamma|z_2|^2)^{-1}$. À partir de la trace sur l'environnement (ici le champ de rayonnement), justifier le fait que la cohérence entre les composantes $z_1 = 0$ et $z$ de $|\Phi\rangle$ est perdue après l'émission spontanée d'un seul photon.

### 18.4.7 Dissipation dans un système à deux niveaux

**1.** Partant de (18.68), déduire les équations d'évolution pour les éléments de matrice de l'opérateur statistique $\rho$ :

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{00}}{\mathrm{d}t} = \big(G_+ + G_+^*\big)\rho_{11} - \big(G_- + G_-^*\big)\rho_{00}$$
$$\frac{\mathrm{d}\rho_{01}}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\omega_0\rho_{01} - \big(G_+^* + G_-\big)\rho_{01} + \big(G_+ + G_-^*\big)\rho_{10}$$

La dernière ligne de (18.68) ne contribue donc pas à l'évolution des populations.

**2.** Montrer qu'à l'approximation séculaire, on peut négliger le terme $\big(G_+ + G_-^*\big)\rho_{10}$ dans l'évolution de $\rho_{01}$. Dans le cadre de cette approximation, récrire les équations d'évolution en terme de $\Gamma_\pm$ and $\Delta_\pm$ (18.71)–(18.72). Vérifier que le taux de relaxation est $\Gamma = \Gamma_+ + \Gamma_-$ pour les populations et $\Gamma/2$ pour les cohérences.

**3.** À partir des expressions de $\Gamma_+$ et $\Gamma_-$, montrer qu'à l'équilibre les populations des niveaux $|0\rangle$ et $|1\rangle$ sont

$$\mathsf{p}_0 = \frac{\Gamma_-}{\Gamma} \qquad \mathsf{p}_1 = \frac{\Gamma_+}{\Gamma}$$

et que leur rapport est donné par la loi de Boltzmann

$$\frac{\mathsf{p}_1}{\mathsf{p}_0} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{k_{\mathrm{B}}T}\right)$$

### 18.4.8 Approximation séculaire et équation de Lindblad

**1.** On écrit l'interaction système-réservoir (18.47) sous la forme générale[19]

$$W = \sum_\alpha A_\alpha \otimes R_\alpha$$

Partons de la représentation spectrale de $H_A$

$$H_A = \sum_\varepsilon \varepsilon\,\mathcal{P}(\varepsilon)$$

où $\mathcal{P}(\varepsilon)$ est le projecteur sur le sous-espace de la valeur propre $\varepsilon$ pour définir l'opérateur $A_\alpha(\omega)$ par

$$A_\alpha(\omega) = \sum_{\varepsilon'-\varepsilon=\hbar\omega} \mathcal{P}(\varepsilon)A_\alpha\mathcal{P}(\varepsilon')$$

Montrer que

$$[H_A, A_\alpha(\omega)] = -\hbar\omega A_\alpha(\omega)$$

19. Breuer et Petruccione [2002], chapitre 3.

Les opérateurs $A_\alpha(\omega)$ sont les “opérateurs propres” de $H_A$. Le commutateur ci-dessus généralise

$$\Big[-\frac{1}{2}\,\hbar\omega\sigma_3,\sigma_\pm\Big]=\mp\hbar\omega\sigma_\pm\quad\text{ou}\quad[\hbar\omega a^\dagger a,a]=-\hbar\omega a$$

**2.** On généralise (18.66) en écrivant

$$G_+^{\alpha\beta}(\omega)=\int_0^\infty \mathrm{d}t'\,\mathrm{Tr}\,[R_\alpha(t)R_\beta(t-t')\rho_R(0)]\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega t'}$$

Montrer que l'équation d'évolution de $\tilde\rho$ est

$$\frac{\mathrm{d}\tilde\rho}{\mathrm{d}t}=\sum_{\omega,\omega'}\sum_{\alpha,\beta}\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}(\omega'-\omega)t}G_+^{\alpha\beta}(\omega)\Big[A_\beta(\omega)\tilde\rho(t)A_\alpha^\dagger(\omega')-A_\alpha^\dagger(\omega')A_\beta(\omega)\tilde\rho(t)\Big]+\text{h.c.}$$

L'approximation séculaire consiste à omettre tous les termes tels que $\omega\neq\omega'$.

**3.** Une fois faite l'approximation séculaire, montrer que les populations $\rho_{nn}(t)=\mathsf{p}(n,t)$ vérifient l'équation de Pauli à condition que le spectre de $H_A$ soit non dégénéré

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathsf{p}(n,t)=\sum_m[W(n|m)\mathsf{p}(m,t)-W(m|n)\mathsf{p}(n,t)]$$

Donner l'expression des coefficients $W(m|n)$.

## 18.4.9 Modèles simples de relaxation

**1.** Dans le premier modèle, un atome à deux niveaux $\mathcal{A}$ est préparé dans une superposition des états fondamental $|0_A\rangle$ et excité $|1_A\rangle$ au temps $t=0$. Le champ électromagnétique est supposé dans son état fondamental (le vide) $|0_E\rangle$, de sorte que le vecteur d'état initial est

$$|\Psi(t=0)\rangle=(\lambda|0_A\rangle+\mu|1_A\rangle)\otimes|0_E\rangle,\qquad |\lambda|^2+|\mu|^2=1$$

Guidés par la méthode de Wigner–Weisskopf (Appendice B), nous écrivons le vecteur d'état au temps $t$ comme

$$|\Psi(t)\rangle=\lambda|0_A\otimes 0_E\rangle+\alpha\mu|0_A\otimes 1_E\rangle+\mu\,\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}\omega_0+\Gamma/2)t}|1_A\otimes 0_E\rangle$$

où $|1_A\rangle$ est un état à un photon normalisé. Utiliser la conservation de la norme $||\Psi(t)||^2=1$ pour calculer $\alpha$ et déduire de ce calcul les élements de matrice de l'opérateur statistique au temps $t$. Comparer avec les modèles d'amortissement de la section 18.2 et trouver les opérateurs de Kraus. Montrer que $T_2=2T_1$.

**2.** Dans le second modèle, l'état $|1\rangle$ est supposé stable, mais la fréquence de résonance dépend du temps. Ceci sera le cas par exemple en RMN, où un

spin 1/2 est soumis à un champ magnétique fluctuant $\vec{B}_0(t)$. Le vecteur d'état du spin est au temps $t$

$$|\Psi(t)\rangle = \lambda(t)|0\rangle + \mu(t)|1\rangle$$

avec $\lambda(t)$ et $\mu(t)$ donnés par

$$\mathrm{i}\dot{\lambda}(t) = -\frac{1}{2}\,\omega_0(t)\lambda(t) \qquad \mathrm{i}\dot{\mu}(t) = \frac{1}{2}\,\omega_0(t)\mu(t) \qquad \lambda(0) = \lambda_0, \quad \mu(0) = \mu_0$$

La solution est

$$\lambda(t) = \lambda_0 \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{2}\int_0^t \omega_0(t')\mathrm{d}t'\right) \qquad \mu(t) = \mu_0 \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2}\int_0^t \omega_0(t')\mathrm{d}t'\right)$$

On suppose que $\omega_0(t)$ est une fonction aléatoire gaussienne dont la fonction d'autocorrélation connexe est

$$C(t') = \langle\omega_0(t+t')\omega_0(t)\rangle - \langle\omega_0\rangle^2$$

où $\langle\bullet\rangle$ est une moyenne d'ensemble sur toutes les réalisations de la fonction aléatoire. Supposant aussi que

$$C(t') \simeq C\exp\left(-\frac{|t'|}{\tau}\right)$$

montrer que les populations $\rho_0$ et $\rho_{11}$ sont indépendantes du temps, mais que les cohérences sont données par

$$\rho_{01}(t) = \rho_{01}(t=0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\langle\omega_0\rangle t}\,\mathrm{e}^{-C\tau t}, \qquad t \gg \tau.$$

### 18.4.10 Un autre choix pour la fonction spectrale $J(\omega)$

Au lieu de (18.84), on utilise un autre choix de fonction spectrale $J(\omega)$, à savoir

$$J(\omega) = M\gamma\omega\,\frac{\omega_*^2}{\omega^2+\omega_*^2}$$

Montrer que la partie réelle $C(t)$ de la fonction d'autocorrélation est

$$C(t) = k_{\mathrm{B}}TM\gamma\omega_*\mathrm{e}^{-\omega_*|t|}$$

Montrer que toutes les étapes conduisant à (18.96) restent valables avec cette nouvelle fonction spectrale.

### 18.4.11 L'équation de Fokker-Planck-Kramers pour une particule brownienne

**1.** Déduire de (18.96) l'équation aux dérivées partielles (Fokker-Planck-Kramers) pour la distribution de Wigner (12.116) $w(x,p;t)$ :

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{p}{M}\,\frac{\partial w}{\partial x} = \gamma\frac{\partial}{\partial p}\,[pw] + D\frac{\partial^2 w}{\partial p^2}$$

**2.** Intégrer sur $x$ pour obtenir une équation de Fokker–Planck pour la densité de probabilité $w_p(p;t)$

$$\frac{\partial w_p}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial p}\left[p w_p\right] + D \frac{\partial^2 w_p}{\partial p^2}$$

Montrer que dans la limite des temps longs $w_p$ est une distribution de Maxwell et retrouver la relation d'Einstein entre $\gamma$ et $k_{\mathrm{B}}T$.

## 18.5 Bibliographie

Ce chapitre s'est inspiré des sources suivantes : Peres [1993], chapitre 9, Preskill [1999], chapitre 3, Nielsen et Chuang [2001], chapitres 2 et 8, Dalibard [2003], Haroche et Raimond [2006], chapitre 4 et Breuer et Petruccione [2002], chapitres 3 et 4. Levitt [2001], chapitre 16 étudie les mécanismes de relaxation en RMN. Le concept de système quantique ouvert est largement utilisé en optique quantique : voir par exemple Carmichael [1993] ou Scully et Zubairy [1997]. Les effets de mémoire et le mouvement brownien sont étudiés en détail par exemple dans Foerster [1975], chapitres 1 à 6 ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 9. Le modèle du § 18.3.4 a été proposé par Caldeira et Leggett [1983] ; voir également Cohen-Tannoudji *et al.* [1998], chapitre IV. On trouvera des références récentes sur le modèle de Caldeira-Leggett dans l'article de revue de Zurek [2003].

# Chapitre 19

# Physique quantique relativiste

Jusqu'à présent, nous avons uniquement considéré le cas où les particules de masse non nulle, électrons, protons, atomes... avaient un vitesse $v$ faible par rapport à la vitesse de la lumière : $v \ll c$. Les seules particules "relativistes" que nous avons prises en compte étaient les photons, particules de masse nulle se déplaçant à la vitesse de la lumière. Le groupe d'invariance de la physique non relativiste est le groupe de Galilée, et l'équation de Schrödinger est "covariante de Galilée" : elle a la même forme dans tous les référentiels galiléens. Pour passer au cas de la relativité restreinte, la première idée qui vient à l'esprit – et c'est effectivement celle qui fut explorée par les pionniers aux alentours de 1925/1930 – est de construire une généralisation relativiste de l'équation de Schrödinger, c'est-à-dire une équation à une particule qui soit covariante de Lorentz, et non de Galilée. Cette idée est *a priori* pertinente, mais elle ne peut être poussée à son terme : toute équation d'onde relativiste à une particule se heurte à des difficultés d'interprétation insurmontables et ces équations d'onde doivent être réinterprétées dans le cadre d'une théorie quantique des champs donnant la possibilité de créer et d'annihiler des particules. C'est après tout logique : la relativité restreinte permet la conversion d'énergie cinétique en énergie de masse et *vice versa*, et une équation qui prétend décrire une particule unique ne doit pas être compatible avec cette relativité.

Nous avons pu mesurer dans les chapitres précédents, et en particulier dans les chapitres 7 à 9, l'importance des considérations de symétrie et de groupe d'invariance. Le groupe d'invariance de la physique relativiste est le groupe de Poincaré, combinaison des translations d'espace-temps et des transformations de Lorentz, aussi appelé groupe de Lorentz inhomogène. La section 19.1 donne les résultats de base sur les groupes de Lorentz et de Poincaré. La section 19.2 décrit l'analyse de Wigner des représentations irréductibles du groupe de Poincaré, analyse qui conduit au résultat fondamental suivant : les particules élémentaires sont caractérisées par leur masse et leur spin, car ce sont les propriétés qui servent à étiqueter les représentations irréductibles. On met ainsi en lumière le lien profond entre ces propriétés et le groupe

d'invariance sous-jacent. La section 19.3 est consacrée à la construction de l'équation de Dirac, équation d'onde relativiste pour les particules de spin 1/2, et à sa solution dans le cas de l'atome d'hydrogène. La section 19.4 décrit les propriétés de symétrie et la dernière section est une courte introduction à la quantification du champ de Dirac.
**NB** : Dans ce chapitre nous utilisons un système d'unités tel que $\hbar = c = 1$.

## 19.1 Les groupes de Lorentz et de Poincaré

### 19.1.1 Transformations de Lorentz spéciales

En relativité restreinte, les transformations de Lorentz (ou plus précisément les transformations de Lorentz spéciales) permettent de passer d'un premier référentiel d'inertie à un second se déplaçant par rapport au premier avec une vitesse uniforme $\vec{v}$. Dans le cas particulier d'une vitesse dirigée suivant $Oz$, les coordonnées de temps $t$ et d'espace $(x, y, z)$ d'un événement se transforment suivant la loi (rappelons que $c = 1$)

$$\begin{aligned} t' &= \frac{t - vz}{\sqrt{1 - v^2}} \\ z' &= \frac{z - vt}{\sqrt{1 - v^2}} \\ x' &= x \qquad\qquad y' = y \end{aligned} \tag{19.1}$$

où $t, x, y, z$ sont les coordonnées de l'événement dans le premier référentiel, $t', x', y', z'$ ses coordonnées dans le second. L'équation (19.1) définit une *transformation de Lorentz spéciale* (ou *transformation de Lorentz pure*, aussi appelée *boost)* de vitesse $v$ le long de l'axe $Oz$. La transformation (19.1) est une *transformation passive* : le *même* événement est vu dans deux référentiels différents.

Au lieu de la vitesse $v$, il est plus commode de paramétrer la transformation de Lorentz (19.1) à l'aide de la *rapidité* $\eta = \tanh v$. Sous forme matricielle, les deux premières lignes de (19.1) deviennent

$$\begin{pmatrix} t' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh\eta & -\sinh\eta \\ -\sinh\eta & \cosh\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ z \end{pmatrix} \tag{19.2}$$

Pour déduire (19.2) de (19.1), nous avons utilisé les identités de trigonométrie hyperbolique

$$\cosh\eta = \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2\eta}} \qquad\qquad \sinh\eta = \frac{\tanh\eta}{\sqrt{1 - \tanh^2\eta}}$$

L'avantage de la rapidité est d'être un *paramètre additif* : la composition d'une transformation de Lorentz spéciale de rapidité $\eta$ et d'une seconde transformation spéciale de rapidité $\eta'$ (le long d'un même axe !) est une transformation

de Lorentz de rapidité $\eta'' = \eta + \eta'$. En effet, en multipliant deux matrices de type (19.2) et en utilisant des identités de trigonométrie hyperbolique, on obtient

$$\begin{pmatrix} t'' \\ z'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh\eta' & -\sinh\eta' \\ -\sinh\eta' & \cosh\eta' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cosh\eta & -\sinh\eta \\ -\sinh\eta & \cosh\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ z \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \cosh(\eta+\eta') & -\sinh(\eta+\eta') \\ -\sinh(\eta+\eta') & \cosh(\eta+\eta') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ z \end{pmatrix}$$

La transformation $(t, z) \to (t'', z'')$ est donc de rapidité $\eta'' = \eta' + \eta$. Contrairement à la rapidité, la vitesse n'est pas un paramètre additif, et la loi d'addition des vitesses

$$v'' = \frac{v + v'}{1 + vv'}$$

est complexe parce que c'est une loi d'addition de tangentes hyperboliques. La paramétrisation des transformations de Lorentz par les vitesses serait l'analogue d'une paramétrisation des rotations par les tangentes des angles au lieu des angles de rotation eux-mêmes, ce qui serait manifestement un assez mauvais choix. Compte tenu de

$$\cos \mathrm{i}\eta = \cosh\eta \qquad\qquad \sin \mathrm{i}\eta = \mathrm{i}\sinh \mathrm{i}\eta$$

et bien que cette observation ne soit pas particulièrement utile pour la suite, on voit d'ailleurs que l'équation (19.2) peut être interprétée comme une rotation d'angle imaginaire $\mathrm{i}\eta$ dans le plan $(\mathrm{i}t, z)$. Le passage à un temps imaginaire est appelé *rotation de Wick* (voir la note 5 du chapitre 12).

### 19.1.2 Produit scalaire de Minkowski

L'observation suivante sera fondamentale pour ce qui suit : la quantité $(t^2 - z^2)$ est invariante par toute transformation de Lorentz spéciale le long de $Oz$

$$t'^2 - z'^2 = t^2 - z^2 \tag{19.3}$$

identité qui se déduit de (19.2) et de $(\cosh^2\eta - \sinh^2\eta) = 1$. On généralise ce résultat en considérant un second événement de coordonnées $(t_1, z_1)$ dont les coordonnées transformées de Lorentz sont $(t'_1, z'_1)$. Si $\lambda$ est un nombre réel, la quantité $(t + \lambda t_1)^2 - (z + \lambda z_1)^2$ doit être invariante par cette transformation, ce qui montre que

$$t't'_1 - z'z'_1 = t\,t_1 - z\,z_1 \tag{19.4}$$

Une transformation de Lorentz le long de $Oz$ conserve donc non pas le produit scalaire habituel dans un espace euclidien $(t, z)$ qui serait $(t\,t_1 + z\,z_1)$, mais le *produit scalaire de Minkowski* $(t\,t_1 - z\,z_1)$.

Introduisons maintenant les notations quadri-dimensionnelles de la relativité retreinte. Un ensemble $(t, x, y, z) \equiv (t, \vec{r}) \equiv (t, \vec{x})$ d'une coordonnée

de temps et de trois coordonnées d'espace définit un point de l'espace-temps spécifiant les coordonnées d'un événement, et le vecteur joignant l'origine à ce point est appelé *quadrivecteur*, que l'on représentera par le symbole $\underset{\sim}{x}$. La composante de temps d'un quadrivecteur est indicée par un exposant 0 et les coordonnées d'espace sont indicées par un exposant latin $i = 1,\ 2,\ 3$. Avec ces conventions

$$\underset{\sim}{x} = (t, x, y, z) \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3) \tag{19.5}$$

Les quatre coordonnées sont notées collectivement par un exposant grec $\mu$ variant de 0 à 3 : $\mu = 0,\ 1,\ 2,\ 3$

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) \tag{19.6}$$

Les composantes (19.6) de $x^\mu$ sont appelées *composantes contravariantes* du quadrivecteur. Une transformation de Lorentz spéciale de rapidité $\eta$ le long d'une direction $\hat{n}$ s'écrit avec cette notation

$$\begin{aligned} {x'}^0 &= x^0 \cosh\eta - \vec{x}\cdot\hat{n}\sinh\eta \\ {x'}^i &= x^i - (\vec{x}\cdot\hat{n})\hat{n}^i + [(\vec{x}\cdot\hat{n})\cosh\eta - x^0\sinh\eta]\hat{n}^i \end{aligned} \tag{19.7}$$

En effet, la composante de $\vec{x}$ dans la direction $\hat{n}$ est le produit scalaire tridimensionnel $\vec{x}\cdot\hat{n}$ : si $\hat{n} = \hat{z}$, alors $\vec{x}\cdot\hat{n} = x^3 (\equiv z)$ et l'on retrouve bien (19.2). Le membre de droite de (19.7) est une combinaison linéaire des composantes $x^\mu$ du quadrivecteur $x$ et peut s'écrire sous forme matricielle

$$\boxed{{x'}^\mu = \sum_{\nu=0}^{\nu=3} \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu} \tag{19.8}$$

Examinons la quantité $(x^0)^2 - \vec{x}^{\,2}$ : elle est invariante par toute transformation de Lorentz spéciale (19.7) ainsi que par toute rotation d'espace. Elle est donc invariante par toute combinaison de rotations et de transformations de Lorentz spéciales, et nous appellerons transformation de Lorentz[1] toute combinaison de ce type en généralisant la notation (19.8) à l'ensemble des transformations de Lorentz. Par définition, une transformation de Lorentz (19.8) laisse invariant le produit scalaire de Minkowski de deux quadrivecteurs $\underset{\sim}{x}$ et $\underset{\sim}{y}$ défini par

$$\boxed{\underset{\sim}{x}\cdot\underset{\sim}{y} = x^0 y^0 - \vec{x}\cdot\vec{y} = x^0 y^0 - \sum_{i=1}^{3} x^i y^i} \tag{19.9}$$

1. Comme nous le verrons d'ici peu, il s'agit plus précisément des transformations du groupe de Lorentz connexe.

Afin d'écrire commodément ce produit scalaire de Minkowski[2], introduisons le *tenseur métrique*, ou simplement *métrique* de Minkowski $g_{\mu\nu}$

$$g_{00} = 1 \qquad g_{ii} = -1 \qquad g_{0i} = 0 \qquad g_{ij} = 0 \;\text{ si }\; i \neq j$$

Autrement dit, $g_{\mu\nu}$ est représenté par la matrice diagonale

$$\boxed{g_{\mu\nu} = \text{diagonal}\,(1, -1, -1, -1)} \tag{19.10}$$

Le produit scalaire (19.9) devient alors

$$\underset{\sim}{x} \cdot \underset{\sim}{y} = \sum_{\mu,\nu=0}^{3} x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu \tag{19.11}$$

La *convention d'Einstein* de sommation sur les indices répétés que nous adopterons par la suite, sauf en cas d'ambiguïté possible, permet de simplifier l'écriture : avec cette convention, la sommation $\Sigma$ qui porte sur un indice en haut et un indice en bas est supprimée dans (19.11) qui devient

$$\underset{\sim}{x} \cdot \underset{\sim}{y} = x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu$$

Un quadrivecteur $\underset{\sim}{x}$ est de *genre temps* si $\underset{\sim}{x}^2 > 0$, du *genre espace* si $\underset{\sim}{x}^2 < 0$ et du *genre lumière* si $\underset{\sim}{x}^2 = 0$. On définit aussi les *composantes covariantes* $x_\mu$ d'un quadrivecteur par

$$x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu \qquad x_0 = x^0 \quad x_i = -x^i \tag{19.12}$$

ce qui permet de récrire (19.11)

$$\underset{\sim}{x} \cdot \underset{\sim}{y} = x^\mu y_\mu$$

La distinction entre composantes contravariantes et covariantes d'un quadrivecteur est plutôt triviale en relativité restreinte, mais elle devient essentielle en relativité générale. Le tenseur $g^{\mu\nu}$ est défini par

$$g^{\mu\nu} = g^{\mu\alpha}\, g_{\alpha\beta}\, g^{\beta\mu}$$

et $g^{\mu\nu} = \text{diagonal}\,(1, -1, -1, -1)$. La dérivée partielle par rapport à $x^\mu$, $\partial/\partial x^\mu = \partial_\mu$ est un vecteur covariant

$$\partial_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3}\right)$$

2. Le lecteur doit être prévenu qu'il existe deux conventions pour $g_{\mu\nu}$, celle utilisée dans ce livre, ou métrique de la côte Ouest (des USA) et celle où $g_{\mu\nu} = \text{diagonal}\,(-1, +1, +1, +1)$, ou métrique de la côte Est. La convention adoptée dans le présent texte permet de faire l'économie de multiples signes moins.

Il convient d'être très attentif au signe dans l'équation suivante : si $V^\mu = (V^0, \vec{V})$ est un champ vectoriel $V^\mu(\underset{\sim}{x})$, alors

$$\partial_\mu V^\mu = \frac{\partial V^0}{\partial x^0} + \vec{\nabla} \cdot \vec{V} = \partial_t V^0 + \vec{\nabla} \cdot \vec{V} \tag{19.13}$$

Il est important de se convaincre que le signe devant la partie spatiale $\vec{\nabla} \cdot \vec{V}$ est $(+)$, et non $(-)$ comme dans (19.9) !

### 19.1.3 Groupe de Lorentz connexe

Compte tenu de l'invariance du produit scalaire de Minkowski $\underset{\sim}{x}' \cdot \underset{\sim}{y}' = \underset{\sim}{x} \cdot \underset{\sim}{y}$, l'équation (19.10) montre que la matrice $4 \times 4$ $\Lambda$ définie en (19.8) vérifie

$$\Lambda^\lambda{}_\mu g_{\lambda\tau} \Lambda^\tau{}_\nu = g_{\mu\nu}$$

Nous appellerons de façon générale transformation de Lorentz toute transformation de type (19.8) qui vérifie l'équation ci-dessus, que nous récrivons sous forme matricielle

$$\boxed{\Lambda^T \, g \, \Lambda = g} \tag{19.14}$$

où $\Lambda^T$ est la matrice transposée de $\Lambda$. Les transformations $\Lambda$ définies par (19.14) forment un groupe. En effet, si $\Lambda$ et $\overline{\Lambda}$ sont deux transformations obéissant à (19.14), il en est de même de leur produit $\overline{\Lambda}\Lambda$

$$(\overline{\Lambda}\Lambda)^T g(\overline{\Lambda}\Lambda) = \Lambda^T \overline{\Lambda}^T g \overline{\Lambda}\Lambda = \Lambda^T g \Lambda = g$$

De plus, l'inverse $\Lambda^{-1}$ ainsi que la matrice transposée $\Lambda^T$ vérifient également (19.14), et on remarque que l'équation donnant l'inverse $\Lambda^{-1}$ de $\Lambda$ est

$$\Lambda^{-1} = g \Lambda^T g \tag{19.15}$$

Cette équation se substitue à celle valable pour les matrices orthogonales : $\Lambda^{-1} = \Lambda^T$, par exemple les matrices de rotation.

Prenant le déterminant de (19.14) et tenant compte de $\det g = -1$, on en déduit $\det \Lambda = \pm 1$. D'autre part, l'examen de la composante 00 de (19.14) conduit à la relation

$$(\Lambda^0{}_0)^2 - \sum_{i=1}^{3} (\Lambda^i{}_0)^2 = 1$$

qui montre que $|\Lambda^0_0| \geq 1$. Ces deux remarques permettent de classer les transformations de Lorentz en 4 sous-ensembles

$$\begin{array}{lll} (1) & \det \Lambda = 1 & \Lambda^0_0 \geq 1 \\ (2) & \det \Lambda = 1 & \Lambda^0_0 \leq -1 \\ (3) & \det \Lambda = -1 & \Lambda^0_0 \geq 1 \\ (4) & \det \Lambda = -1 & \Lambda^0_0 \leq -1 \end{array}$$

Les transformations de type (2) et (4) contiennent un changement de signe du temps, tandis que les transformations (3) et (4) contiennent une inversion d'espace $\vec{x} \to -\vec{x}$. Les transformations de type (1) forment un sous-groupe du groupe de Lorentz, le *groupe de Lorentz connexe* noté $\mathcal{L}_+^\uparrow$, et sauf mention explicite du contraire, nous allons nous limiter à ces transformations. La propriété fondamentale du groupe de Lorentz connexe est que tous ses éléments peuvent être reliés de façon continue à l'identité, ce qui n'est manifestement pas le cas pour les transformations (2), (3) et (4) : on ne peut pas passer continûment de $\det\Lambda = +1$ à $\det\Lambda = -1$, pas plus que de $\Lambda^0_{\ 0} \geq 1$ à $\Lambda^0_{\ 0} \leq -1$. Nous montrerons ultérieurement que toute transformation du groupe de Lorentz connexe $\mathcal{L}_+^\uparrow$ est le produit d'une rotation par une transformation de Lorentz spéciale.

Pour passer au groupe de Lorentz inhomogène, ou *groupe de Poincaré* $\mathcal{P}$, ou plus précisément au groupe de Poincaré connexe $\mathcal{P}_+^\uparrow$, on ajoute les translations de $a^\mu$

$$x'^\mu = a^\mu + \Lambda^\mu_{\ \nu} x^\nu \tag{19.16}$$

La translation s'effectue *après* la transformation de Lorentz. La loi de composition de deux transformations du groupe de Poincaré $(a, \Lambda)$ et $(\overline{a}, \overline{\Lambda})$ est donnée par

$$\begin{aligned} x''^\mu &= \overline{a}^\mu + \overline{\Lambda}^\mu_{\ \nu} x'^\nu = \overline{a}^\mu + \overline{\Lambda}^\mu_{\ \nu}(\Lambda^\nu_{\ \rho} x^\rho + a^\nu) \\ &= \overline{a}^\mu + \overline{\Lambda}^\mu_{\ \nu} a^\nu + \overline{\Lambda}^\mu_{\ \nu}\Lambda^\nu_{\ \rho} x^\rho \end{aligned}$$

et la loi de groupe de $\mathcal{P}_+^\uparrow$ est donc

$$\boxed{(\overline{a}, \overline{\Lambda})(a, \Lambda) = (\overline{a} + \overline{\Lambda} a, \overline{\Lambda}\Lambda)} \tag{19.17}$$

### 19.1.4 Relation avec le groupe $SL(2, \mathbb{C})$

Nous avons vu (chapitre 7 et exercice 7.5.2) qu'il existait une relation remarquable entre le groupe des rotations $SO(3)$ et le groupe $SU(2)$ des matrices $2 \times 2$ unitaires et de déterminant unité : à toute rotation $\mathcal{R}$ correspondent deux matrices $\pm V(\mathcal{R})$ de $SU(2)$ telles que la loi de groupe soit respectée au signe près

$$V(\mathcal{R}_1)\, V(\mathcal{R}_2) = \pm V(\mathcal{R}_1\, \mathcal{R}_2) \tag{19.18}$$

Nous avons utilisé la notation $V$ pour les matrices de $SU(2)$, car $U$ est réservé pour un usage ultérieur. Mathématiquement, on dit qu'il existe un homomorphisme de groupe entre $SO(3)$ et $SU(2)$. Contrairement au groupe des rotations $SO(3)$, le groupe $SU(2)$ est simplement connexe : il est appelé groupe de revêtement universel de $SO(3)$. Les deux groupes sont identiques

dans un voisinage de l'identité et ils ont donc la même algèbre de Lie. Reprenons l'exercice 7.5.2 avec les notations du présent chapitre : soit $\underline{x}$, la matrice hermitienne de trace nulle

$$\underline{x} = \sum_{i=1}^{3} \sigma_i \, x^i = \vec{\sigma} \cdot \vec{x} = \begin{pmatrix} x^3 & x^1 - \mathrm{i}x^2 \\ x^1 + \mathrm{i}x^2 & -x^3 \end{pmatrix} \tag{19.19}$$

où les $\sigma_i$ sont les matrices de Pauli, et soit $V \in SU(2)$ ; on note que $\det \underline{x} = -\vec{x}^{\,2}$. La matrice

$$\underline{x}' = V \, \underline{x} \, V^\dagger = V \, \underline{x} \, V^{-1} \tag{19.20}$$

est hermitienne et de trace nulle ; elle est donc de la forme $\underline{x}' = \vec{\sigma} \cdot \vec{x}'$, et de plus $\det X' = -\vec{x'}^{\,2}$, ce qui montre que la longueur du vecteur $\vec{x}$ est conservée. La transformation $x \to x'$ est donc une rotation[3].

Nous allons généraliser cette correspondance remarquable entre $SO(3)$ et $SU(2)$ à une correspondance entre le groupe de Lorentz connexe et le groupe des matrices complexes $2 \times 2$ de déterminant unité, appelé groupe $SL(2, \mathbb{C})$. Une matrice $A \in SL(2, \mathbb{C})$ est de la forme

$$A = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \qquad \alpha\delta - \beta\gamma = 1 \tag{19.21}$$

où $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ sont des nombres complexes. Le groupe $SU(2)$ est manifestement un sous-groupe de $SL(2, \mathbb{C})$. Nous pouvons généraliser (19.19) en construisant la matrice hermitienne $\underline{x} = \underline{x}^\dagger$

$$\underline{x} = \sigma_\mu x^\mu = \sigma_0 x^0 + \vec{\sigma} \cdot \vec{x} = \begin{pmatrix} x^0 + x^3 & x^1 - \mathrm{i}x^2 \\ x^1 + \mathrm{i}x^2 & x^0 - x^3 \end{pmatrix} \tag{19.22}$$

où nous avons défini $\sigma_0 = I$. Par convention, $\sigma^\mu = \sigma_\mu$ : les matrices de Pauli ne forment pas les composantes d'un quadrivecteur. On note que $\det \underline{x} = x^\mu x_\mu = \underset{\sim}{x}^2$. Soit $A$ une matrice de $SL(2, \mathbb{C})$. La généralisation de (19.20) est

$$\boxed{\underline{x} \to \underline{x}' = A \, \underline{x} \, A^\dagger} \tag{19.23}$$

mais à la différence de (19.20), en général $A^\dagger \neq A^{-1}$. La matrice $\underline{x}'$ est hermitienne et de déterminant unité, et (19.23) définit une transformation linéaire sur les quadrivecteurs $\underset{\sim}{x} \to \underset{\sim}{x}'$ qui conserve le produit scalaire de Minkowski. Calculer avec les matrices $2 \times 2$ de $SL(2, \mathbb{C})$ est souvent beaucoup plus économique que d'utiliser les matrices $4 \times 4$ des transformations de Lorentz, et nous

3. En toute rigueur, il pourrait s'agir de la combinaison d'une rotation et d'une inversion d'espace, mais nous montrerons d'ici peu que cette seconde possibilité est exclue.

ferons par la suite un usage intensif de cette propriété. Si l'on veut cependant revenir aux matrices $4 \times 4$ de $\mathcal{L}_+^\uparrow$, la matrice $\Lambda$ qui donne la transformation $\underset{\sim}{x}' = \Lambda \underset{\sim}{x}$ s'obtient en remarquant que (exercice 3.3.5)

$$x'^\mu = \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}(\underline{x}'\sigma_\mu) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(Ax^\nu\sigma_\nu A^\dagger\sigma_\mu)$$

d'où par identification

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(A\sigma_\nu A^\dagger\sigma_\mu) \tag{19.24}$$

On déduit de cette équation la composante $\Lambda^0{}_0$

$$\Lambda^0{}_0 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(AIA^\dagger I) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(AA^\dagger) \geq 0$$

et $\Lambda^\mu{}_\nu$ définie par (19.24) ne change pas le signe du temps. Pour montrer que $\Lambda$ appartient au groupe connexe, il faut se convaincre que $\det\Lambda = +1$. Une démonstation directe est possible, mais il est plus instructif de montrer directement la connexité de $SL(2,\mathbb{C})$. Considérons un trajet dans le groupe de matrices complexes $2 \times 2$, ou groupe $GL(2,\mathbb{C})$, dont $SL(2,\mathbb{C})$ est un sous-groupe, en définissant $B(t) \in GL(2,\mathbb{C})$

$$B(t) = [1-\lambda(t)]I + \lambda(t)A \qquad 0 \leq t \leq 1$$

avec $\lambda(t=0)=0$, $\lambda(t=1)=1$ et $A \in SL(2,\mathbb{C})$. D'après (19.21), le déterminant de $B(t)$ est

$$\det B(t) = [1+\lambda(t)(\alpha-1)][1+\lambda(t)(\gamma-1)] - \beta\gamma$$

C'est donc un trinôme du second degré en $\lambda(t)$ qui a deux zéros dans $\mathbb{C}$. On peut toujours choisir un trajet qui évite ces deux zéros. Soit alors $\mu(t)$, une des deux racines carrées de $\det B(t)$. L'application $t \to \tilde{A}(t) = \mu^{-1}(t)B(t)$ définit un chemin dans $SL(2,\mathbb{C})$ qui va continûment de $I$ vers $A$ puisque $\det\tilde{A}(t) = 1$ : le groupe $SL(2,\mathbb{C})$ est connexe par arcs, et donc connexe. Le sous-groupe $SU(2)$ est donc aussi connexe. Tout comme $SU(2)$ est le groupe de revêtement universel de $SO(3)$, $SL(2,\mathbb{C})$ est le groupe de revêtement universel de $\mathcal{L}_+^\uparrow$.

Tout élément $\Lambda \in \mathcal{L}_+^\uparrow$ peut s'écrire comme le produit d'une rotation par une transformation de Lorentz spéciale. On peut monter directement ce résultat (exercice 19.1), mais il est plus commode d'utiliser la correspondance entre $\mathcal{L}_+^\uparrow$ et $SL(2,\mathbb{C})$. En effet, toute matrice $A \in SL(2,\mathbb{C})$ s'écrit de façon unique comme le produit $A = VH$ d'une matrice hermitienne strictement positive $H$ par une matrice unitaire $V$

$$H^2 = A^\dagger A \qquad V = A(A^\dagger\, A)^{-1/2} \tag{19.25}$$

$H$ est la racine carrée positive unique de $A^\dagger A$ : comme $A^\dagger A$ est une matrice hermitienne strictement positive, elle est diagonalisable et $H$ est définie en

prenant la racine carrée positive de ses valeurs propres. Nous savons déjà que $\Lambda(A)$ est une rotation si et seulement si $A$ est unitaire : dans ce cas, $A \in SU(2)$ et nous avons déjà observé la correspondance entre $SO(3)$ et $SU(2)$. $\Lambda(A)$ est une transformation de Lorentz spéciale si et seulement si $A$ est hermitienne. Pour le montrer, remarquons d'abord qu'une transformation de Lorentz spéciale (19.2) le long de $Oz$ peut s'écrire en fonction des *coordonnées du cône de lumière* $x^{\pm} = x^0 \pm x^3$

$$\begin{aligned} x^+ &= x^0 + x^3 \to x'^0 + x'^3 = (x')^+ = \mathrm{e}^{-\eta/2}\,(x^0 + x^3) \\ x^- &= x^0 - x^3 \to x'^0 + x'^3 = (x')^- = \mathrm{e}^{\eta/2}\,(x^0 + x^3) \end{aligned} \tag{19.26}$$

Ensuite, toute matrice hermitienne $A \in SL(2, \mathbb{C})$ peut être diagonalisée par une matrice unitaire $V$ sous la forme

$$A = V \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\eta/2} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\eta/2} \end{pmatrix} V^{\dagger} = V \mathrm{e}^{-\eta\sigma_3/2}\, V^{\dagger} \tag{19.27}$$

où la forme diagonale suit de $\det A = 1$. $\Lambda(A)$ est donc une transformation de Lorentz spéciale le long de l'axe $\hat{n}$ qui se déduit de $Oz$ par la rotation correspondant à $V$.

### 19.1.5 Cinématique relativiste

Cette sous-section contient un résumé de cinématique relativiste ; pour plus de détails, le lecteur est renvoyé à un manuel de relativité restreinte. La vitesse d'une particule ne possède pas de loi de transformation simple dans un changement de référentiel d'inertie. En revanche, la *quadrivitesse* $u^{\mu}$ définie par

$$u^{\mu} = \frac{\mathrm{d}x^{\mu}}{\mathrm{d}\tau} \tag{19.28}$$

où $\tau$ est le temps propre, $\tau = \sqrt{t^2 - \vec{x}^{\,2}}$, est un quadrivecteur se transformant suivant la loi (19.8). Les composantes $u^{\mu}$ de la quadrivitesse d'une particule se déplaçant à la vitesse $\vec{v}$ dans un référentiel donné sont

$$u^0 = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2}} = \Gamma \qquad \vec{u} = \frac{\vec{v}}{\sqrt{1 - v^2}} = \Gamma \vec{v} \tag{19.29}$$

avec $\Gamma = (1 - v^2)^{-1/2}$. En multipliant par la masse $m$ de la particule, on obtient sa quadri-impulsion $p^{\mu}$ qui est aussi un quadrivecteur puisque $m$ est un scalaire

$$p^0 = E = m\Gamma \qquad \vec{p} = m\Gamma\,\vec{v} \tag{19.30}$$

La combinaison

$$p^{\mu} p_{\mu} = \underset{\sim}{p}^2 = E^2 - p^2 = m^2$$

est un invariant (ou scalaire) de Lorentz, car c'est un produit scalaire de Minkowski. On en déduit les relations

$$E = \sqrt{\vec{p}^{\,2} + m^2} \qquad \vec{v} = \frac{\vec{p}}{E} \tag{19.31}$$

Une particule de masse nulle est telle que $E^2 - p^2 = 0$ et, dans ce cas, $E = |\vec{p}|$.

Nous aurons besoin par la suite de "l'espace de phase relativiste". Remarquons d'abord que

$$\mathrm{d}^4 p = \mathrm{d}p^0\, \mathrm{d}p^1\, \mathrm{d}p^2\, \mathrm{d}p^3$$

est un invariant de Lorentz : $\mathrm{d}^4 p = \mathrm{d}^4 p'$ car le jacobien de la transformation (19.8) faisant passer de $\underset{\sim}{p}$ à $\underset{\sim}{p}'$ est égal à l'unité : $\det \Lambda = 1$. Un autre invariant de Lorentz (ou plus précisément de $\mathcal{L}_+^\uparrow$) est

$$\theta(p^0)\delta(\underset{\sim}{p}^2 - m^2)$$

où $\theta(p^0)$ est la fonction de Heaviside, égale à un si $p^0 > 0$ et à zéro si $p^0 < 0$ ; comme les transformations de $\mathcal{L}_+^\uparrow$ conservent le signe du temps, $\theta(p^0) = \theta(p'^0)$. En écrivant

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}^4 p\, \theta(p^0)\delta(\underset{\sim}{p}^2 - m^2) &= \int \mathrm{d}^3 p\, \mathrm{d}p^0\, \theta(p^0)\delta\left[(p^0 - \sqrt{p^2 + m^2})(p^0 + \sqrt{p^2 + m^2})\right] \\ &= \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{2\sqrt{p^2 + m^2}}\end{aligned}$$

on montre que

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}^3 p}{2\sqrt{p^2 + m^2}} = \frac{\mathrm{d}^3 p}{2E_p}} \tag{19.32}$$

est un invariant de Lorentz : c'est l'élément de volume de l'espace de phase relativiste souvent appelé par abus de langage *espace de phase relativiste.*

## 19.2 L'analyse de Wigner : masse et spin des particules

### 19.2.1 Algèbre de Lie du groupe de Poincaré

Ce qui nous intéresse en dernière analyse, c'est de trouver l'action dans l'espace de Hilbert des états d'une transformation $(a, \Lambda)$ du groupe de Poincaré $\mathcal{P}_+^\uparrow$ sous la forme d'un opérateur unitaire $U(a, \Lambda)$. Les opérateurs $U(a, \Lambda)$ doivent former une représentation unitaire du groupe de Poincaré, ce qui implique d'après (19.17) que l'on ait au signe près

$$U(\overline{a}, \overline{\Lambda})\, U(a, \Lambda) = U(\overline{a} + \overline{\Lambda} a, \overline{\Lambda}\, \Lambda) \tag{19.33}$$

Les opérateurs $U(a,\Lambda)$ sont fonctions des translations $a$ et des transformations de Lorentz $\Lambda \in \mathcal{L}_+^\uparrow$ et sont écrits comme exponentielles de générateurs infinitésimaux ou comme produits de telles exponentielles. Il nous faut déterminer les propriétés des générateurs infinitésimaux hermitiens du groupe de Poincaré, et en particulier leurs relations de commutation. Ces générateurs sont au nombre de 10 : 4 pour les translations, 3 pour les rotations et 3 pour les boosts. Le groupe de Poincaré est un groupe de Lie à 10 paramètres. Nous allons suivre une stratégie parallèle à celle utilisée pour le groupe des rotations : au § 7.2.3, étant donné dans l'espace ordinaire à trois dimensions une rotation d'angle $\theta$ autour d'un axe $\hat{n}$, nous avons construit l'opérateur unitaire agissant dans l'espace des états comme exponentielle d'un générateur infinitésimal hermitien

$$U(\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta J_{\hat{n}}}$$

où $J_{\hat{n}} = \vec{J}\cdot\hat{n}$ est le générateur infinitésimal des rotations autour de $\hat{n}$, et nous en avons déduit les relations de commutation des $J_i$. Cependant, il existe une différence essentielle avec le cas des représentations du groupe des rotations : *il n'existe pas de représentation unitaire de dimension finie du groupe de Lorentz.*

Nous allons considérer une transformation infinitésimale de $\mathcal{P}_+^\uparrow$ paramétrée par une translation infinitésimale $\varepsilon^\mu$ ($|\varepsilon^\mu| \ll 1$) et une transformation de Lorentz infinitésimale

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + \varpi^\mu{}_\nu \qquad\qquad |\varpi^\mu{}_\nu| \ll 1 \tag{19.34}$$

Le formalisme introduit dans (19.34) permet de traiter simultanément rotations et boosts. On définit la matrice $\omega = g\varpi$, soit en explicitant les indices $\omega_{\mu\nu} = g_{\mu\lambda}\varpi^\lambda{}_\nu$. Compte tenu de (19.13), on observe que $\omega$ est une matrice antisymétrique réelle

$$\varpi^T g = -g\varpi \Longrightarrow \omega^T = -\omega$$

ou, en explicitant les indices

$$\omega_{\mu\nu} + \omega_{\nu\mu} = 0$$

Nous aurons également besoin de la formule donnant $\varpi$ en fonction de $\omega$ : $\varpi = g\omega$, soit $\varpi^\lambda{}_\nu = g^{\lambda\mu}\omega_{\mu\nu}$. Ecrivons une transformation de l'espace des états $U(\varepsilon, I+\varpi)$ sous la forme

$$U(\varepsilon, I+\varpi) = I + \frac{\mathrm{i}}{2}\,\omega_{\sigma\tau}J^{\sigma\tau} + \mathrm{i}\varepsilon_\sigma P^\sigma \tag{19.35}$$

L'unitarité de $U$ implique que les opérateurs $J^{\sigma\tau}$ et $P^\sigma$ sont hermitiens

$$J^{\sigma\tau} = (J^{\sigma\tau})^\dagger \qquad\qquad P^\sigma = (P^\sigma)^\dagger \tag{19.36}$$

mais, ainsi que nous l'avons souligné, $J^{\sigma\tau}$ ne peut pas être représenté par une matrice unitaire dans un espace de dimension finie. Comme $\omega_{\sigma\tau}$ est antisymétrique, on peut toujours choisir $J^{\sigma\tau}$ antisymétrique

$$J^{\sigma\tau} = -J^{\tau\sigma}$$

Pour déterminer les lois de transformation des générateurs infinitésimaux $P^\sigma$ et $J^{\sigma\tau}$, nous allons examiner le produit

$$U(a,\Lambda)\,U(\varepsilon, I+\varpi)\,U^{-1}(a,\Lambda) \tag{19.37}$$

où $a$ et $\Lambda$ sont finis (non infinitésimaux). La loi de groupe (19.17) se traduit par l'équation (19.33) tandis que l'inverse $U^{-1}(a,\Lambda)$ est donné par

$$U^{-1}(a,\Lambda) = U(-\Lambda^{-1}a, \Lambda^{-1}) \tag{19.38}$$

Utilisons la loi de groupe (19.33) pour évaluler le produit (19.37)

$$U(a,\Lambda)U(\varepsilon, I+\varpi)U^{-1}(a,\Lambda) = U(\Lambda\varepsilon - \Lambda\varpi\Lambda^{-1}a, \Lambda\,(I+\varpi)\Lambda^{-1})$$

et développons le membre de droite de cette équation au premier ordre en $\varepsilon$ et $\omega$ en utilisant (19.35)

$$U(a,\Lambda)\left[\frac{1}{2}\,\omega_{\sigma\tau}J^{\sigma\tau} + \varepsilon_\sigma P^\sigma\right]U^{-1}(a,\Lambda) = \frac{1}{2}X_{\mu\nu}J^{\mu\nu} + \left(\Lambda\varepsilon - \Lambda\varpi\Lambda^{-1}a\right)_\mu P^\mu \tag{19.39}$$

La matrice infinitésimale antisymétrique $X_{\mu\nu}$ correspondant à la transformation $\Lambda\varpi\Lambda^{-1}$ est donnée par

$$X = g\Lambda\varpi\Lambda^{-1} = (\Lambda^T)^{-1}\omega\Lambda^{-1}$$

Cette matrice est manifestement antisymétrique, $X^T = -X$, en raison de $\omega^T = -\omega$. En explicitant les indices, on écrit $X_{\mu\nu}$

$$X_{\mu\nu} = ([\Lambda^T]^{-1})^\mu{}_\sigma\omega_{\sigma\tau}(\Lambda^{-1})^\tau{}_\nu = (\Lambda^{-1})^\sigma{}_\mu\omega_{\sigma\tau}(\Lambda^{-1})^\tau{}_\nu \tag{19.40}$$

En identifiant le coefficient de $\omega_{\sigma\tau}$ dans les deux membres de (19.39) et en utilisant la propriété d'antisymétrie $X_{\mu\nu} = -X_{\nu\mu}$, on obtient

$$U(a,\Lambda)J^{\sigma\tau}U^{-1}(a,\Lambda) = (\Lambda^{-1})^\sigma{}_\mu(\Lambda^{-1})^\tau{}_\nu\,(J^{\mu\nu} - a^\mu P^\nu + a^\nu P^\mu) \tag{19.41}$$

L'identification du coefficient de $\varepsilon_\sigma$ donne la loi de transformation de $P^\sigma$

$$U(a,\Lambda)P^\sigma U^{-1}(a,\Lambda) = (\Lambda^{-1})^\sigma{}_\mu P^\mu \tag{19.42}$$

Nous avons donc obtenu en (19.41) et (19.42) les lois de transformation des générateurs infinitésimaux $J^{\sigma\tau}$ et $P^\sigma$. Les relations de commutation de ces générateurs se déduisent de (19.41) et (19.42) en prenant $a$ et $\Lambda$ infinitésimaux,

$a = \varepsilon$ et $\Lambda = I + \varpi$. Afin de simplifier la discussion, nous nous limitons au cas $\varepsilon = 0$ en renvoyant le cas général à l'exercice 19.2. Ecrivons

$$U(0,\Lambda) = U(\Lambda) = I + \frac{\mathrm{i}}{2}\,\omega_{\alpha\beta}J^{\alpha\beta}$$

Si nous développons (19.41) au premier ordre en $\omega$, le premier membre de cette équation fait apparaître un commutateur

$$\frac{\mathrm{i}}{2}\,\omega_{\alpha\beta}[J^{\alpha\beta}, J^{\sigma\tau}]$$

Pour évaluer le membre de droite, nous utilisons

$$(\Lambda^{-1})^{\sigma}{}_{\mu} = \delta^{\sigma}_{\mu} - \varpi^{\sigma}{}_{\mu} = \delta^{\sigma}_{\mu} - g^{\sigma\alpha}\omega_{\alpha\mu}$$

ce qui donne pour le membre de droite de (19.41)

$$\begin{aligned}(\Lambda^{-1})^{\sigma}{}_{\mu}(\Lambda^{-1})^{\tau}{}_{\nu}J^{\mu\nu} &= \left[\delta^{\sigma}_{\mu}\delta^{\tau}_{\nu} + \delta^{\sigma}_{\mu}\omega_{\beta\nu}g^{\beta\tau} - \delta^{\tau}_{\nu}\omega_{\alpha\mu}g^{\lambda\sigma}\right]J^{\mu\nu}\\ &= J^{\sigma\tau} - \omega_{\alpha\beta}g^{\beta\tau}J^{\alpha\sigma} - \omega_{\alpha\beta}g^{\alpha\sigma}J^{\beta\tau}\end{aligned}$$

Comme $\omega_{\alpha\beta}$ est antisymétrique, il faut d'abord antisymétriser le coefficient de $\omega_{\alpha\beta}$ dans le membre de droite de l'équation précédente avant de pouvoir procéder à l'identification dans les deux membres de l'équation. Cette antisymétrisation conduit à l'expression suivante du commutateur $[J^{\alpha\beta}, J^{\sigma\tau}]$

$$\boxed{\mathrm{i}[J^{\alpha\beta}, J^{\sigma\tau}] = g^{\beta\sigma}J^{\alpha\tau} - g^{\alpha\sigma}J^{\beta\tau} - g^{\beta\tau}J^{\alpha\sigma} + g^{\alpha\tau}J^{\beta\sigma}} \tag{19.43}$$

On vérifie, comme il se doit, que le second membre de (19.43) est antisymétrique dans les échanges $\alpha \leftrightarrow \beta$, $\sigma \leftrightarrow \tau$ et $(\alpha\beta) \leftrightarrow (\sigma\tau)$. Ces relations de commutation sont complétées par celles des $P^{\sigma}$ (exercice 19.2)

$$\begin{aligned}\mathrm{i}[J^{\alpha\beta}, P^{\sigma}] &= g^{\sigma\beta}P^{\alpha} - g^{\sigma\alpha}P^{\beta}\\ [P^{\sigma}, P^{\tau}] &= 0\end{aligned} \tag{19.44}$$

La première ligne de (19.44) montre que $P^{\mu}$ se transforme comme un quadrivecteur. Pour faire le lien avec les résultats du chapitre 7 sur le moment angulaire, définissons le vecteur tridimensionnel moment angulaire $\vec{J}$

$$\vec{J} = \{J_1 = -J^{23}, J_2 = -J^{31}, J_3 = -J^{12}\} \tag{19.45}$$

ainsi que le vecteur tridimensionnel boost

$$\vec{K} = \{K_1 = -J^{01}, K_2 = -J^{02}, K_3 = -J^{03}\} \tag{19.46}$$

On vérifie à partir de (19.43) les relations de commutation

$$\begin{aligned}[J_l, J_m] &= \mathrm{i}\varepsilon_{lmp}J_p\\ [J_l, K_m] &= \mathrm{i}\varepsilon_{lmp}K_p\\ [K_l, K_m] &= -\mathrm{i}\varepsilon_{lmp}J_p\end{aligned} \tag{19.47}$$

On peut se contenter de calculer les commutateurs $[J_1, J_2]$, $[J_1, K_2]$ et $[K_1, K_2]$ : les autres commutateurs s'en déduisent par permutation circulaire. Il faut souligner le signe moins dans la troisième équation (19.47). On remarque que les générateurs des rotations $J_i$ commutent avec $P^0$, l'opérateur énergie que l'on peut identifier au hamiltonien : ces générateurs sont donc conservés, au contraire des générateurs $K_i$ des boosts qui ne commutent pas avec le hamiltonien. Ceci n'est pas surprenant, car les boosts modifient l'énergie.

Outre le signe moins, un point très important est visible dans la dernière des relations (19.47) : le produit de deux transformations de Lorentz spéciales n'est pas en général une transformation de Lorentz spéciale, mais la combinaison d'une telle transformation et d'une rotation. Considérons en effet le produit de deux transformations de Lorentz spéciales suivant les axes $\hat{x}_1$ et $\hat{x}_2$, de rapidités respectives $\eta_1$ et $\eta_2$, avec $|\eta_1|, |\eta_2| \ll 1$ : $U = \exp(\mathrm{i}\eta_2 K_2)\exp(\mathrm{i}\eta_1 K_1)$. Le calcul peut se faire par un développement limité à l'ordre 2 en $\eta$, mais il est plus simple d'utiliser la formule de Baker-Campbell-Hausdorff pour deux opérateurs $A$ et $B$

$$\exp A \exp B = \exp\left(B + A + \frac{1}{2}[B, A] + \frac{1}{12}[B, [B, A]] + \cdots\right)$$

qui donne directement à l'ordre $\eta^2$

$$\exp(\mathrm{i}\eta_2 K_2)\exp(\mathrm{i}\eta_1 K_1) = \exp\left(\mathrm{i}\eta_1 K_1 + \mathrm{i}\eta_2 K_2 + \frac{1}{2}\eta_1\eta_2 J_3 + \cdots\right)$$

La présence dans cette expression de l'opérateur de rotation $J_3$ montre que le produit de deux transformations de Lorentz suivant des axes différents contient une rotation, appelée *rotation de Thomas* (ou de Thomas-Wigner), voir l'exercice 19.3.

Lorsque la translation $a$ et la transformation de Lorentz $\Lambda$ ne sont pas infinitésimales, on peut écrire[4]

$$U(a, \Lambda) = U(a, 0)U(0, \Lambda) = \exp\left(\mathrm{i}a_\mu P^\mu\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{2}\,\omega_{\mu\nu}J^{\mu\nu}\right) \tag{19.48}$$

ou bien utiliser la décomposition de $\Lambda$ en une transformation de Lorentz spéciale et une rotation et écrire $U(a, \Lambda)$ comme un produit de 3 exponentielles.

4. En raison de la décomposition (19.25) de toute transformation de Lorentz comme produit d'une rotation $\Lambda_{\mathcal{R}}$ et d'un boost $\Lambda_{\mathcal{B}}$, il est toujours possible d'écrire

$$U(\Lambda) = U(\Lambda_{\mathcal{R}})U(\Lambda_{\mathcal{B}})$$

Bien que le résultat soit difficile à prouver, on montre que toute transformation de Lorentz peut aussi s'écrire comme l'exponentielle d'un générateur infinitésimal, ce qui permet de généraliser l'expression $U(\mathcal{R}) = \exp(-\mathrm{i}\theta J_{\hat{n}})$, mais nous n'aurons pas à nous servir de cette propriété.

## 19.2.2 États à une particule : masse et spin

Comme nous l'avons mentionné, notre objectif est de déterminer la loi de transformation des systèmes quantiques élémentaires sous une transformation $U(a, \Lambda)$ du groupe de Poincaré. Un système quantique élémentaire est par définition un système stable en l'absence de toute influence extérieure : particule élémentaire comme l'électron ou le proton (mais pas le neutron !), atome ou noyau atomique stables, etc. Par commodité, nous appellerons simplement un tel système une “particule". Nous choisirons comme base des états à une particule des états de quadri-impulsion bien définie $p^\mu$. Ceci est possible car les 4 générateurs infinitésimaux $P^\mu$ commutent (voir (19.44)), et on peut donc trouver des vecteurs propres $|\underset{\sim}{p}\rangle$ communs à ces 4 générateurs

$$P^\mu |\underset{\sim}{p}\rangle = p^\mu |\underset{\sim}{p}\rangle \tag{19.49}$$

Dans la suite de cette section, nous allégerons les notations en notant les quadrivecteurs $p$ au lieu de $\underset{\sim}{p}$ : l'équation (19.49) devient simplement $P^\mu|p\rangle = p^\mu|p\rangle$. Ainsi que nous l'avons observé au § 19.1.1, les transformations de Lorentz spéciales définies par (19.1) ou (19.2) sont des transformations passives. Par souci de cohérence avec les conventions utilisées dans les chapitres 7 à 9, nous allons adopter le point de vue actif, où un boost dans la direction $\hat{x}_1$ par exemple transforme une particule de masse $m$ au repos ($\vec{p} = 0$) en une particule d'énergie $m \cosh\eta$ et d'impulsion $p^1 = m \sinh\eta$. Si l'impulsion initiale est $(p^0, p^1, p^2, p^3)$, cette transformation de Lorentz s'écrit

$$\begin{pmatrix} p'^0 \\ p'^1 \\ p'^2 \\ p'^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh\eta & \sinh\eta & 0 & 0 \\ \sinh\eta & \cosh\eta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p^0 \\ p^1 \\ p^2 \\ p^3 \end{pmatrix} \tag{19.50}$$

On note le signe (+) devant $\sinh\eta$ au lieu du signe (−) de (19.2), ce qui correspond au passage du point de vue passif au point de vue actif. Examinons les boosts infinitésimaux en commençant par un boost $\Lambda_{\mathcal{B}}^{(1)}(\omega)$ de rapidité infinitésimale $\eta = \omega$, $|\omega| \ll 1$, suivant $\hat{x}_1$

$$\Lambda_{\mathcal{B}}^{(1)}(\omega) = I + \mathrm{i}\omega I^{01} = I + \omega \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{19.51}$$

ce qui définit le générateur infinitésimal $I^{01}$. Nous avons utilisé la notation $I^{\mu\nu}$ pour les générateurs infinitésimaux, car il s'agit maintenant des générateurs dans l'espace de Minkowski à quatre dimensions, et non dans l'espace de Hilbert des états. Le générateur $I^{01}$ n'est pas hermitien, car il n'existe pas de représentation unitaire du groupe de Lorentz dans un espace vectoriel de

dimension finie : il ne faut pas confondre les générateurs $J^{\mu\nu}$ agissant dans l'espace des états et les générateurs $I^{\mu\nu}$ agissant dans l'espace-temps à quatre dimensions. Le boost fini de rapidité $\eta$ (19.50) s'écrit aussi $\Lambda_{\mathcal{B}}^{(1)}(\eta) = \exp(\mathrm{i}\eta I^{01})$. Une rotation $\Lambda_{\mathcal{R}}^{(3)}(\theta)$ d'angle $\theta$ autour de $\hat{x}_3$ est représentée par la matrice

$$\Lambda_{\mathcal{R}}^{(3)}(\theta) = \exp(\mathrm{i}\theta I^{12}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

et la rotation infinitésimale d'angle $\theta = \omega$ s'exprime en fonction du générateur infinitésimal $I^{12}$

$$\Lambda_{\mathcal{R}}^{(3)}(\omega) = I + \mathrm{i}\omega I^{12} = I + \omega \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{19.52}$$

Les autres générateurs $I^{0i}$ et $I^{ij}$ se déduisent de (19.51) et (19.52) par permutation circulaire et l'ensemble des résultats est résumé ci-dessous

$$\mathrm{i}I^{01} = \begin{pmatrix} 0&1&0&0 \\ 1&0&0&0 \\ 0&0&0&0 \\ 0&0&0&0 \end{pmatrix} \qquad \mathrm{i}I^{02} = \begin{pmatrix} 0&0&1&0 \\ 0&0&0&0 \\ 1&0&0&0 \\ 0&0&0&0 \end{pmatrix} \qquad \mathrm{i}I^{03} = \begin{pmatrix} 0&0&0&1 \\ 0&0&0&0 \\ 0&0&0&0 \\ 1&0&0&0 \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{i}I^{12} = \begin{pmatrix} 0&0&0&0 \\ 0&0&-1&0 \\ 0&1&0&0 \\ 0&0&0&0 \end{pmatrix} \qquad \mathrm{i}I^{23} = \begin{pmatrix} 0&0&0&0 \\ 0&0&0&0 \\ 0&0&0&-1 \\ 0&0&1&0 \end{pmatrix} \qquad \mathrm{i}I^{31} = \begin{pmatrix} 0&0&0&0 \\ 0&0&0&1 \\ 0&0&0&0 \\ 0&-1&0&0 \end{pmatrix} \tag{19.53}$$

On vérifie par inspection que l'expression générale des éléments de matrice de $I^{\mu\nu}$ est donnée par

$$\mathrm{i}[I^{\mu\nu}]^{\alpha}_{\ \beta} = g^{\mu\alpha}\delta^{\nu}_{\beta} - g^{\nu\alpha}\delta^{\mu}_{\beta} \tag{19.54}$$

Il suffit bien sûr de le vérifier pour $I^{01}$ et $I^{12}$ par exemple, les autre matrices s'en déduisant par permutation circulaire. En suivant (19.45) et(19.46), nous pouvons définir les générateurs infinitésimaux des rotations ($J_i$) et des boosts ($K_i$)

$$J_1 = -I^{23} \qquad J_2 = -I^{31} \qquad J_3 = -I^{12}$$
$$K_1 = -I^{01} \qquad K_2 = -I^{02} \qquad K_3 = -I^{03}$$

Ainsi que nous l'avons déjà observé, les générateurs $I^{ij}$ sont hermitiens, contrairement aux générateurs $I^{0i}$ ; ils obéissent aux relations de commutation (19.47). Une transformation de Lorentz générale s'écrira comme $\exp(\mathrm{i}\omega_{\mu\nu}I^{\mu\nu}/2)$ : voir la note 4.

L'objectif de l'analyse de Wigner est de caractériser les représentations unitaires irréductibles du groupe de Poincaré. Rappelons notre analyse du groupe des rotations : nous avons étiqueté les représentations irréductibles par l'invariant $\vec{J}^2 = j(j+1)$ qui commute avec tous les générateurs $J_i$ des rotations : $[\vec{J}^2, J_i] = 0$. Nous allons procéder de façon similaire avec le groupe de Poincaré, en recherchant les combinaisons de générateurs qui commutent avec l'ensemble des $P^\mu$ et des $J^{\mu\nu}$. Le point de départ de l'analyse de Wigner est l'identification des transformations de Lorentz qui laissent invariant le quadrivecteur $p^\mu$ : ces transformations forment un sous-groupe du groupe de Lorentz appelé *petit groupe* de $p$. L'invariance de $p$ implique, compte tenu de (19.54)

$$\mathrm{i}\,\omega_{\mu\nu}[I^{\mu\nu}]^\alpha_{\ \beta}p^\beta = \omega_{\mu\nu}\left[g^{\mu\alpha}\delta^\nu_\beta - g^{\nu\alpha}\delta^\mu_\beta\right]p^\beta = 2\omega_{\alpha\mu}p^\mu = 0$$

ce qui montre que $\omega_{\mu\nu}$ vérifie $\omega_{\mu\nu}p^\nu = 0$. La solution de cette équation pour $\omega_{\mu\nu}$ est de la forme

$$\omega_{\mu\nu} = \varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}h^\rho p^\sigma \qquad (19.55)$$

où $\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$ est le tenseur d'ordre 4 complètement antisymétrique avec $\varepsilon_{0123} = 1$, et $h$ un quadrivecteur arbitraire qui n'est pas parallèle à $p$. Ainsi, les transformations $U(0,\Lambda) = U(\Lambda(p))$ qui laissent $p$ invariant sont de la forme

$$U(\Lambda(p)) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{2}\,\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}J^{\mu\nu}h^\rho p^\sigma\right) \qquad (19.56)$$

Compte tenu de (19.49), nous pouvons écrire

$$U(\Lambda(p))|p\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}W\cdot h}|p\rangle \qquad (19.57)$$

où l'opérateur $W_\mu$ a été défini par

$$\boxed{W_\mu = -\frac{1}{2}\,\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}J^{\nu\rho}P^\sigma} \qquad (19.58)$$

Par construction, $W_\mu$ est un (pseudo) quadrivecteur. Comme les indices $\nu$, $\rho$ et $\sigma$ sont différents, les opérateurs $J^{\mu\nu}$ et $P^\sigma$ commutent dans (19.58). Les relations de commutation

$$\begin{aligned}
[W_\mu, P_\nu] &= 0 \\
[J_{\mu\nu}, W_\lambda] &= \mathrm{i}(g_{\mu\lambda}W_\nu - g_{\nu\lambda}W_\mu) \\
[W_\mu, W_\nu] &= -\mathrm{i}\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}W^\rho P^\sigma
\end{aligned} \qquad (19.59)$$

se déduisent aisément de (19.43) et (19.44) (exercice 19.4) ; on peut écrire directement les deux premières équations, qui traduisent le fait que $W_\mu$ est un (pseudo) quadrivecteur se transformant comme $P_\mu$ et en déduire la dernière.

Afin d'identifier les représentations irréductibles, cherchons les invariants possibles : ce sont les produits scalaires $P^2 = P_\mu P^\mu$ et $W^2 = W_\mu W^\mu$ qui

commutent avec tous les générateurs du groupe de Poincaré ; on peut montrer que ce sont les seuls invariants. Toute représentation irréductible du groupe de Poincaré est donc étiquetée par les valeurs propres de $P^2$ et $W^2$. Nous savons déjà que $P^2$ est le carré de la masse

$$P^2|p\rangle = m^2|p\rangle$$

et nous allons voir dans un instant que $-W^2/m^2$ est le carré d'un spin : *tous les systèmes quantiques élémentaires sont caractérisés par leur masse et leur spin.* Si le système quantique est une particule, l'analyse de Wigner permet de comprendre l'origine profonde de la masse et du spin des particules : ce sont des propriétés liées à l'invariance par rapport au groupe de Poincaré.

Comme $W$ commute avec $P$, $W|p\rangle$ est encore un vecteur propre de $P$ avec la valeur propre $p$. Appelons $W(p)$ la restriction de $W$ au sous-espace des états de valeur propre $p$. Comme $W(p) \cdot p = 0$, $W(p)$ peut être développé sur une base de vecteurs orthogonaux à $p$ au sens de la métrique de Minkowski. A ce point, il est nécessaire de faire la distinction entre deux cas : $p^2 > 0$ $(m \neq 0)$ et $p^2 = 0$ $(m{=}0)$. Nous supposerons aussi $p^0 > 0$, le cas $p^0 < 0$ (tout comme le cas $p^2 < 0$) ne présentant pas d'intérêt physique.

### 19.2.3 Particules de masse non nulle

Dans ce cas, le petit groupe de $p$ est le groupe des rotations, ce qui est évident si la particule est au repos : $p = (p^0 = m, \vec{p} = 0)$. Au lieu du groupe de Lorentz, il est commode d'utiliser son groupe de revêtement universel $SL(2,\mathbb{C})$, et le petit groupe est donc $SU(2)$. Nous écrirons donc $U(A)$ au lieu de $U(\Lambda)$, $A$ étant une des matrices de $SL(2,\mathbb{C})$ correspondant à $\Lambda$. À chaque quadrivecteur $p^\mu$, on attache une transformation $[p] \in SL(2,\mathbb{C})$ qui transforme les quatre vecteurs de la base orthogonale suivante de l'espace de Minkowski

$$[\overset{o}{p}] = \{[p^0 = m, \vec{p} = 0\,], n_1(\overset{o}{p}) = \hat{x}_1, n_2(\overset{o}{p}) = \hat{x}_2, n_3(\overset{o}{p}) = \hat{x}_3\} \tag{19.60}$$

dans les quatre vecteurs de la base

$$[p] = \{[p^0, \vec{p}], n_1(p), n_2(p), n_3(p)\} \tag{19.61}$$

où les $n_i(p)$ sont trois quadrivecteurs du genre espace $(n_i^2(p) < 0)$ vérifiant

$$n_i(p) \cdot n_j(p) = -\delta_{ij} \qquad\qquad p \cdot n_i(p) = 0 \tag{19.62}$$

L'ensemble des 4 vecteurs $[p]$ est appelé *tétrade*. Afin de ne pas alourdir inutilement les notations, nous utilisons la notation $[p]$ pour désigner *à la fois* la tétrade $[p]$ et la transformation de $SL(2,\mathbb{C})$ qui fait passer de la tétrade $[\overset{o}{p}]$ à $[p]$. Comme $W(p)$ est orthogonal à $p$, on peut le décomposer sur les vecteurs

$n_i(p)$ avec des composantes $S_i(p)$

$$\begin{aligned} W(p) &= m\sum_{i=1}^{3} S_i(p)\cdot n_i(p) \\ mS_i(p) &= -W(p)\cdot n_i(p) \end{aligned} \tag{19.63}$$

De (19.59), on déduit les relations de commutation des $S_i(p)$

$$[S_i(p), S_j(p)] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}S_k \tag{19.64}$$

Ces relations de commutation montrent que les $S_i(p)$ sont les générateurs infinitésimaux d'un groupe $SU(2)$ qui n'est autre que le petit groupe de $p$. Compte tenu des propriétés générales des opérateurs de moment angulaire, on observe que la somme

$$\sum_{i=1}^{3} S_i^2(p) = -\frac{W^2}{m^2} = s(s+1) \tag{19.65}$$

où $s$ est entier ou demi-entier : c'est le spin de la particule.

Un ensemble complet d'opérateurs compatibles est donné par $P^\mu$, $-W^2/m^2$ et l'un des $S_i(p)$, par exemple $S_3(p)$. Les valeurs propres de ces opérateurs sont respectivement $p^\mu$, $s(s+1)$ et $s_3$, où $s_3$ est entier ou demi-entier suivant la valeur de $s$ avec $-s \le s_3 \le s$. Une base des états à une particule peut être formée des vecteurs $|[p], s, s_3\rangle$

$$\begin{aligned} P^\mu|[p], s, s_3\rangle &= p^\mu|[p], s, s_3\rangle \\ -\frac{W^2}{m^2}|[p], s, s_3\rangle &= s(s+1)|[p], s, s_3\rangle \\ S_3(p)|[p], s, s_3\rangle &= s_3|[p], s, s_3\rangle \end{aligned} \tag{19.66}$$

Examinons les propriétés de transformation des états $|[p], s, s_3\rangle$ par application de $U(a, A)$ : rappelons qu'à la transformation de Lorentz $\Lambda$ correspond une matrice $A \in SL(2,\mathbb{C})$, et que $[p]$ désigne la matrice de $SL(2,\mathbb{C})$ qui transforme la tétrade $[\overset{o}{p}]$ (19.61) dans la tétrade $[p]$ (19.62). Pour toute rotation $V \in SU(2)$ appliquée sur une particule au repos, nous avons la loi de transformation usuelle (9.26)

$$U(V)|[\overset{o}{p}], s, s_3\rangle = |[\overset{o}{p}], s, s_3'\rangle\, D^{(s)}_{s_3'\,s_3}(V) \tag{19.67}$$

où $D^{(s)}_{s_3'\,s_3}(V)$ est un élément de la matrice de rotation correspondant au moment angulaire $s$ et à la rotation $V$. On en déduit l'action de $U(a, A)$ sur un état $|[p], s, s_3\rangle$ en écrivant d'abord

$$\begin{aligned} U(a, A)|[p], s, s_3\rangle &= U(a, I)U(A)|[p], s, s_3\rangle \\ &= U(a, I)U([Ap])U([Ap]^{-1}A[p])|[\overset{o}{p}], s, s_3\rangle \end{aligned} \tag{19.68}$$

Pour comprendre cette équation, rappelons que si $x$ est un quadrivecteur et $A \in SL(2,\mathbb{C})$, le transformé $x'$ de $x$ par $A$ est donné par $\underline{x}' = A\underline{x}A^\dagger$. La transformation $A$ fait passer de $p$ à $p' = Ap$ ($\underline{p}' = A\underline{p}A^\dagger$), et $[Ap]$ fait passer de la tétrade $[\overset{o}{p}]$ à la tétrade $[Ap]$. Par conséquent, $[Ap]^{-1}A[p]$ est une rotation de Thomas-Wigner : partant d'une particule au repos, on retrouve une particule au repos, mais les axes d'espace ont changé. La partie non triviale réside dans le fait que les transformés $An_i(p)$ des vecteurs $n_i(p)$ de la tétrade initiale $[p]$ ne sont pas identiques aux vecteurs $n_i(Ap)$ de la tétrade finale $[Ap]$ : $An_i(p) \neq n_i(Ap)$. Poursuivant le calcul et utilisant (19.68), nous obtenons

$$\begin{aligned} U(a,A)|[p],s,s_3\rangle &= U(a,I)U([Ap])|[\overset{o}{p}],s,s_3'\rangle D^{(s)}_{s_3'\,s_3}([Ap]^{-1}A[p]) \\ &= U(a,I)|[Ap],s,s_3'\rangle D^{(s)}_{s_3'\,s_3}([Ap]^{-1}A[p]) \end{aligned}$$

et finalement

$$\boxed{U(a,A)|[p],s,s_3\rangle = \exp[\mathrm{i}(Ap)\cdot a]\,|[Ap],s,s_3'\rangle D^{(s)}_{s_3',s_3}([Ap]^{-1}A[p])} \qquad (19.69)$$

ce qui résout le problème posé : l'équation (19.69) donne la loi de transformation de l'état $|[p],s,s_3\rangle$ quand on lui applique $U(a,A)$.

### 19.2.4 Particules de masse nulle

Examinons à présent le cas $p^2 = 0$, c'est-à-dire celui des particules de masse nulle $m = 0$. Construisons un ensemble de deux vecteurs attachés à $p^\mu$ en choisissant deux vecteurs de genre espace $n_1(p)$ et $n_2(p)$ orthogonaux à $p$

$$n_1^2(p) = n_2^2(p) = -1 \qquad n_1(p)\cdot n_2(p) = 0 \qquad p\cdot n_i(p) = 0 \qquad (19.70)$$

Comme dans le cas des particules de masse non nulle, il sera utile de définir un ensemble standard de trois vecteurs formé de $\overset{o}{p}$ et $n_i(\overset{o}{p})$ définis par

$$\overset{o}{p} = (1,0,0,1) \qquad n_1(\overset{o}{p}) = (0,1,0,0) \qquad n_2(\overset{o}{p}) = (0,0,1,0) \qquad (19.71)$$

Cherchons comme précédemment les transformations qui laissent invariant $\overset{o}{p}$, c'est-à-dire les transformations du petit groupe de $\overset{o}{p}$. La matrice $\underline{\overset{o}{p}}$ est

$$\underline{\overset{o}{p}} = \sigma_0 + \sigma_3 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

et si $A \in SL(2,\mathbb{C})$ est donnée par (19.21), alors

$$A\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}A^\dagger = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\gamma^* \\ \alpha^*\gamma & |\gamma|^2 \end{pmatrix}$$

ce qui montre que $|\alpha| = 1$ et $\gamma = 0$. La condition $\det A = 1$ implique $\delta = 1/\alpha$, tandis que $\beta$ est un nombre complexe arbitraire $\beta = z$ ; par conséquent, les matrices $A$ du petit groupe de $\overset{o}{p}$ sont de la forme

$$A = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\phi/2} & z \\ 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi/2} \end{pmatrix} \tag{19.72}$$

Ces matrices engendrent un groupe euclidien à deux dimensions, le groupe des déplacements du plan.

Examinons à présent les transformations infinitésimales du petit groupe : $|\phi| \ll 1$ et $z = \varepsilon, |\varepsilon| \ll 1$. Il est facile (exercice 19.5) de trouver les matrices $4 \times 4$ $\Lambda$ correspondantes

$$\Lambda^{\mu}{}_{\nu} = \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & 0 \\ \varepsilon_1 & 1 & \phi & -\varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 & -\phi & 1 & -\varepsilon_2 \\ 0 & \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & 1 \end{pmatrix} \tag{19.73}$$

où $\varepsilon_1$ et $\varepsilon_2$ sont deux paramètres réels : $\varepsilon_1 = (\varepsilon + \varepsilon^*)/2$ et $\varepsilon_2 = \mathrm{i}(\varepsilon - \varepsilon^*)/2$. Cela donne la matrice antisymétrique $\omega_{\mu\nu}$ (19.33), $\omega = g\Lambda$

$$\omega_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & 0 \\ -\varepsilon_1 & 0 & -\phi & \varepsilon_1 \\ -\varepsilon_2 & \phi & 0 & \varepsilon_2 \\ 0 & -\varepsilon_1 & -\varepsilon_2 & 0 \end{pmatrix} \tag{19.74}$$

ce qui implique $\omega_{01} = \omega_{13} = \varepsilon_1$, $\omega_{02} = \omega_{23} = \varepsilon_2$ et $\omega_{12} = -\phi$. Une transformation infinitésimale $U(A)$ s'écrit donc

$$U(A) = I + \frac{\mathrm{i}}{2}\,\omega_{\mu\nu}J^{\mu\nu} = I + \mathrm{i}\varepsilon_1(K_1 + J_2) + \mathrm{i}\varepsilon_2(K_2 - J_1) - \mathrm{i}\phi J_3 \tag{19.75}$$

où les opérateurs $J_i$ et $K_i$ sont définis en (19.45). L'équation (19.75) suggère d'introduire les opérateurs $C$ et $D$

$$C = K_1 + J_2 \qquad\qquad D = K_2 - J_1 \tag{19.76}$$

dont les relations de commutation entre eux et avec $J_3$ sont

$$[C, D] = 0 \qquad\quad [J_3, C] = \mathrm{i}D \qquad\quad [J_3, D] = -\mathrm{i}C \tag{19.77}$$

Les opérateurs $C$ et $D$ peuvent être diagonalisés simultanément. Les transformations $U(A)$, où $A$ appartient au petit groupe de $p$, vont se trouver considérablement simplifiées si l'on impose une restriction sur $W(p)$. En effet, le calcul des composantes de $W(p)$, compte tenu de (19.58) et de $p = (1, 0, 0, 1)$ donne le résultat suivant

$$\begin{aligned} W_0(p) &= J_3 \qquad\quad W_1(p) = J_1 - K_2 = -D \\ W_3(p) &= -J_3 \qquad\quad W_2(p) = J_2 + K_1 = C \end{aligned} \tag{19.78}$$

de sorte que $W^2(p) = -(C^2 + D^2)$. La quantité $-W^2(p)$ est un nombre positif ou nul qui peut être arbitrairement grand. Cependant, il n'existe pas dans la nature de particule de masse nulle dont le spin soit un nombre arbitraire, qui pourrait même être arbitrairement grand. Nous allons donc imposer la restriction $W^2(p) = 0$, ce qui implique en outre que $W(p) \cdot p = 0$ et que $W(p)$ est parallèle à $p$ : $W(p) = \Pi(p)p$ (noter que $p_\mu = (1, 0, 0, -1)\,!$). Un autre argument en faveur du choix $C = D = 0$ est développé dans l'exercice 19.5.

Pour définir dans l'espace de Hilbert une base des états $|[\overset{o}{p}], \lambda\rangle$ à une particule dans le cas de la masse nulle, nous choisirons comme opérateurs compatibles $P^\mu$ et $-W_3(p) = J_3$

$$P^\mu|[\overset{o}{p}], \lambda\rangle = p^\mu|[\overset{o}{p}], \lambda\rangle \qquad J_3|[p], \lambda\rangle = \lambda|[p], \lambda\rangle \tag{19.79}$$

Le nombre quantique $\lambda$ est appelé *hélicité* : c'est la projection du spin sur la direction de l'impulsion $\vec{p}$ de la particule : comme $p^\mu = (1, 0, 0, 1)$, $\vec{p}$ est parallèle à l'axe $\hat{x}_3$. La loi de transformation dans une rotation de $\phi$ autour de $\hat{x}_3$ s'obtient par application de l'opérateur de rotation $\exp(-\mathrm{i}\phi J_3)$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi J_3}|[\overset{o}{p}], \lambda\rangle = |[\overset{o}{p}](\phi), \lambda\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\phi}|[\overset{o}{p}], \lambda\rangle \tag{19.80}$$

L'état $|[\overset{o}{p}], \lambda\rangle$ doit rester inchangé dans une rotation de $4\pi$, ce qui implique que $\lambda$ soit entier ou demi-entier. Compte tenu des propriétés des matrices de rotation, on peut récrire (19.80) sous la forme (voir l'équation (9.32))

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi J_3}|[\overset{o}{p}], \lambda\rangle = |[\overset{o}{p}](\phi), \lambda\rangle = |[\overset{o}{p}], \lambda\rangle D^{(|\lambda|)}_{\lambda\lambda}(\theta = 0, \phi)$$

La loi de transformation générale analogue de (19.69) se déduit de l'équation précédente

$$\boxed{U(a, A)|[p], \lambda\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(Ap)\cdot a}|[Ap], \lambda\rangle\, D^{(|\lambda|)}_{\lambda\lambda}([Ap]^{-1}A[p])} \tag{19.81}$$

Les équations (19.69) et (19.81) sont fondamentales pour l'étude relativiste des collisions et des désintégrations de particules de spin non nul.

L'hélicité $\lambda$ est invariante dans toute transformation de Lorentz : une particule de masse nulle garde toujours la même hélicité, et apparaît donc identique à elle-même dans tous les référentiels d'inertie (en dehors de son énergie et de son impulsion). On appelle $s = |\lambda|$ le spin de la particule de masse nulle : $s = 0, 1/2, 1, 3/2\ldots$ L'hélicité ne peut prendre que deux valeurs, $\lambda = s$ et $\lambda = -s$, mais si l'on se restreint aux transformations du groupe connexe, il n'y a aucun moyen de passer de $\lambda = s$ à $\lambda = -s$. Si les neutrinos, particules de spin 1/2, avaient une masse nulle, les neutrinos auraient par définition une hélicité $\lambda = -1/2$ et les antineutrinos une hélicité $\lambda = 1/2$. L'expérience montre que la masse des neutrinos est non nulle, ce qui rend la situation plus compliquée.

Les photons, particules de masse nulle et de spin 1, ont deux états d'hélicité : $\lambda = +1$ et $\lambda = -1$. Ces deux états correspondent à des états de

polarisation circulaire bien définie : $\lambda = +1$ à un état de polarisation circulaire droite et $\lambda = -1$ à un état de polarisation circulaire gauche. Considérons un photon d'impulsion parallèle à $\overset{o}{p}$ et décomposons sa polarisation sur les vecteurs $n_i(p)$ orthogonaux à $\overset{o}{p}$ ; soit $\overset{o}{p}(\phi) = \overset{o}{p}'$, le transformé par rotation de $\phi$ autour de l'axe $\hat{x}_3$. Les transformations du petit groupe de $\overset{o}{p}$ appliquées aux vecteurs $n_i(p)$ donnent

$$\begin{aligned} n'_1(p) &= n_1(p)\,\cos\phi - n_2(p)\,\sin\phi + \alpha_1 p \\ n'_2(p) &= n_1(p)\,\sin\phi + n_2(p)\,\cos\phi + \alpha_2 p \end{aligned} \tag{19.82}$$

où $\alpha_1$ et $\alpha_2$ sont des nombres complexes. Cette loi de transformation reflète le fait que les vecteurs $n_i(p)$ ne sont pas des quadrivecteurs : à la transformation de Lorentz s'ajoute en général une transformation de jauge : dans l'espace de Fourier, la transformation $A_\mu(x) \to A_\mu(x) + \partial_\mu\lambda(x)$ se traduit par l'adjonction d'un terme proprotionnel à $p_\mu$.

# 19.3 L'équation de Dirac

## 19.3.1 Construction de l'équation de Dirac

La relation entre l'énergie et l'impulsion pour une particule libre non relativiste est $E = \vec{p}^2/2m$ et l'équation d'onde pour cette particule se déduit du principe de correspondance

$$E \to \mathrm{i}\,\frac{\partial}{\partial t} \qquad \vec{p} \to -\mathrm{i}\vec{\nabla}$$

qui donne l'équation de Schrödinger pour une particule libre

$$\mathrm{i}\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m}\,\nabla^2\psi$$

Pour écrire une équation d'onde covariante de Lorentz, c'est-à-dire une équation qui garde la même forme dans une transformation de Lorentz, on peut essayer de partir de la relation relativiste $E^2 = \vec{p}^2 + m^2$ entre énergie et impulsion et appliquer le principe de correspondance, ce qui donne l'équation suivante pour une hypothétique fonction d'onde $\psi(t, \vec{x}) = \psi(x)$

$$(\partial_t^2 - \vec{\nabla}^2 + m^2)\psi = (\partial^2 + m^2)\psi = 0 \tag{19.83}$$

L'opérateur $\partial^2 = \partial_\mu\partial^\mu = \partial_t^2 - \vec{\nabla}^2$ est le *d'Alembertien.* L'équation (19.83) est appelée *équation de Klein-Gordon.* On montre à partir de (19.83) que le courant $j^\mu$ défini par

$$\begin{gathered} j_\mu = (\rho, \vec{j}) = \psi^*\partial_\mu\psi - (\partial_\mu\psi)^*\psi \\ \rho = \psi^*\partial_t\psi - (\partial_t\psi)^*\psi \qquad \vec{j} = \psi^*\vec{\nabla}\psi - (\vec{\nabla}\psi)^*\psi \end{gathered} \tag{19.84}$$

est un courant conservé (exercice 19.6.6)

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \partial_\mu j^\mu = 0 \tag{19.85}$$

On remarquera le signe + devant $\vec{\nabla} \cdot \vec{j}$. Cependant, la densité $\rho$ n'est pas définie positive et on ne peut pas interpréter $\psi$ comme une amplitude de probabilité. En fait, $\psi$ doit être considéré comme un champ *classique*, qu'il est nécessaire de quantifier suivant la procédure utilisée pour le champ électromagnétique. Dans le cadre d'une telle théorie des champs quantiques, $\psi$ devient un opérateur de champ, qui crée et annihile des particules. On montre que ces particules sont de spin zéro : l'équation de Klein-Gordon décrit des particules de spin zéro.

En 1928, et en suivant des arguments dont nous savons aujourd'hui qu'ils ne sont pas convaincants, Dirac fut capable de construire l'équation d'onde relativiste qui porte son nom. L'équation de Dirac va un peu plus loin que celle de Klein-Gordon en tant qu'équation d'onde pour une particule quantique : elle donne une excellente approximation tant que le potentiel varie peu sur une distance de l'ordre de $1/m$ ($\hbar/mc$ en rétablissant $\hbar$ et $c$), la longueur d'onde Compton de la particule. Mais cette interprétation comme équation d'onde à une particule ne peut être maintenue de façon complètement cohérente. Comme dans le cas de l'équation de Klein-Gordon, il faut interpréter $\psi$ non pas comme une fonction d'onde, mais comme un champ classique qu'il est nécessaire de quantifier (section 19.5). Dans ce cadre, l'équation de Dirac décrit correctement des particules de spin 1/2.

Pour construire l'équation de Dirac, revenons à l'équation (19.23). Dans le cas d'une rotation de $\theta$ autour d'un axe $\hat{n}$, la matrice $A$ s'écrit (exercice 7.5.3)

$$A = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{2}\,\theta(\vec{\sigma}\cdot\hat{n})\right] = I\cos\frac{\theta}{2} - \mathrm{i}\,\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\,\sin\frac{\theta}{2} \tag{19.86}$$

Nous avons écrit l'expression d'un boost de rapidité $\eta$ suivant $\hat{x}_3$ en (19.27), et il est immédiat de généraliser à un boost suivant $\hat{n}$

$$A = \exp\left[\frac{1}{2}\,\eta\,\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\right] = I\cosh\frac{\eta}{2} + \vec{\sigma}\cdot\hat{n}\,\sinh\frac{\eta}{2} \tag{19.87}$$

où le changement de signe de $\eta$ a pour origine le passage du point de vue passif au point de vue actif. Un *spineur de Pauli* $\chi$ est par définition un vecteur de composantes $(\chi_1, \chi_2)$ dans un espace complexe à deux dimensions qui se transforme par rotation comme un spin 1/2

$$\chi \to \chi' = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{2}\,\theta\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{n})\right]\chi \tag{19.88}$$

Un *spineur de Weyl* est un spineur qui se transforme par rotation comme un spineur de Pauli et dans un boost (19.87) comme

$$\chi \to \chi' = \exp\left[\frac{1}{2}\,\eta\,\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\right]\chi \tag{19.89}$$

On note que cette loi de transformation n'est pas unitaire, contrairement à (19.88) : elle ne conserve pas le carré de la norme $\|\chi\|^2 = |\chi_1|^2 + |\chi_2|^2$. Dans une transformation de Lorentz générale, la loi de transformation des spineurs est $\chi \to \chi' = A\chi$, où $A \in SL(2, \mathbb{C})$.

Soit $A \in SL(2, \mathbb{C})$ : on appelle *automorphisme du groupe* $SL(2, \mathbb{C})$, une correspondance bijective $A \leftrightarrow B$ où $B \in SL(2, \mathbb{C})$ qui respecte la loi de groupe : si $A_1 \leftrightarrow B_1$ et $A_2 \leftrightarrow B_2$, alors $A_1 A_2 \leftrightarrow B_1 B_2$. Un exemple d'automorphisme de ce type est donné par la correspondance

$$A \leftrightarrow B = (A^T)^{-1}$$

En effet

$$[(A_1 A_2)^T]^{-1} = [A_2^T A_1^T]^{-1} = (A_1^T)^{-1}(A_2^T)^{-1}$$

On montre alors facilement (exercice 19.6.7) que $A$ et $(A^T)^{-1}$ sont reliés par la transformation de similarité

$$(A^T)^{-1} = \zeta A \zeta^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$\zeta = -\mathrm{i}\sigma_2$ représente une rotation de $\pi$ autour de l'axe $\hat{x}_2$. Un autre automorphisme, celui que nous allons utiliser, est donné par la correspondance $A \leftrightarrow B = (A^\dagger)^{-1}$. Si $A$ est donné par (19.21), nous avons

$$(A^\dagger)^{-1} = \begin{pmatrix} \delta^* & -\gamma^* \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \tag{19.90}$$

Dans ce cas (exercice 19.6.7), il n'existe pas de matrice[5] $\zeta$ telle que $(A^\dagger)^{-1} = \zeta A \zeta^{-1}$ : $A$ et $(A^\dagger)^{-1}$ ne sont pas reliés par une transformation de similarité. Par définition, les spineurs $\chi$ se tranforment suivant $\chi \to \chi' = A\chi$, et nous allons introduire un second type de spineur de Weyl noté $\varphi$ qui se transforme suivant $\varphi \to \varphi' = (A^\dagger)^{-1}\varphi$. Lorsque $A$ est unitaire, $(A^\dagger)^{-1} = A$, et *dans une rotation les deux types de spineur ont la même loi de transformation.* Mais

5. Un autre automorphisme de $SL(2, \mathbb{C})$ est $A \leftrightarrow A^*$ et comme

$$(A^\dagger)^{-1} = \left[(A^T)^{-1}\right]^*$$

$A^*$ est relié à $(A^\dagger)^{-1}$ par une transformation de similarité

$$A^* = \zeta\, (A^\dagger)^{-1}\, \zeta^{-1}$$

Dans les livres de théorie des champs quantiques, et en particulier dans ceux qui traitent de la supersymétrie, on utilise $A^*$ plutôt que $(A^\dagger)^{-1}$ et on définit des spineurs “non pointés" $\chi$ et des spineurs “pointés" $\hat{\varphi}$ qui se transforment suivant

$$\chi_\alpha \to \chi'_\alpha = A_{\alpha\beta}\chi_\beta \qquad \hat{\varphi}_{\dot{\alpha}} \to \hat{\varphi}'_{\dot{\alpha}} = A^*_{\dot{\alpha}\dot{\beta}}\hat{\varphi}_{\dot{\beta}}$$

cela n'est plus vrai pour une transformation de Lorentz, car

$$\left(\left[\exp\left(\frac{1}{2}\,\eta\,\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\right)\right]^{\dagger}\right)^{-1} = \exp\left(-\frac{1}{2}\,\eta\,\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\right) \quad \text{soit } \varphi \to \varphi' = \exp\left(-\frac{1}{2}\,\eta\,\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\right)\varphi \tag{19.91}$$

On observe que le passage de (19.89) à (19.91) correspond à $\hat{n} \to -\hat{n}$, et le passage de $A$ à $(A^{\dagger})^{-1}$ est relié à l'inversion d'espace, ou opération parité : l'opération parité commute avec les rotations, mais pas avec les boosts. Observons également que dans (19.20), $\underline{x} = \sigma_0 x^0 + \vec{\sigma}\cdot\vec{x}$, et qu'une inversion d'espace $\vec{x} \to -\vec{x}$ transforme

$$\underline{x} \to \underline{x}' = \sigma_0 x^0 - \vec{\sigma}\cdot\vec{x}$$

Mais il n'existe aucune matrice $A \in SL(2,\mathbb{C})$ telle que

$$A\,\underline{x}\,A^{\dagger} = \underline{x}'$$

En effet, on devrait avoir

$$AA^{\dagger} = I \qquad A\,\vec{\sigma}A^{\dagger} = -\vec{\sigma}$$

soit $A\vec{\sigma} = -\vec{\sigma}A$, et il n'existe aucune matrice $2\times 2$ unitaire anticommutant avec les trois matrices $\sigma_i$ (exercice 19.6.7). Cela confirme que la correspondance se fait bien entre $SL(2,\mathbb{C})$ et le groupe de Lorentz *connexe* $\mathcal{L}_{+}^{\uparrow}$. Ainsi que nous le montrerons explicitement d'ici peu, les deux types de spineur de Weyl, $\chi$ et $\varphi$, sont reliés par inversion d'espace. Rappelons leur loi de transformation

$$\boxed{\chi \to \chi' = A\chi \qquad \varphi \to \varphi' = (A^{\dagger})^{-1}\varphi} \tag{19.92}$$

Insistons sur le fait que les lois de transformation par rotation sont identiques : si $A \in SU(2)$, $A = (A^{\dagger})^{-1}$, $\chi$ et $\varphi$ décrivent tous deux des spins 1/2.

Nous avons maintenant mis en place tous les ingrédients nécessaires pour construire l'équation de Dirac. Partant d'une particule de masse $m$ initialement au repos décrite par un spineur de Pauli $\xi = \chi$ ou $\xi = \varphi$, nous lui appliquons un boost de rapidité $\eta$ dans la direction $\hat{x}_3$. Son énergie et son impulsion sont données par $E = m\cosh\eta$ et $p_3 = m\sinh\eta$. Compte tenu de (19.89) et (19.91)

$$\chi(p_3) = \exp\left(\frac{1}{2}\eta\sigma_3\right)\xi \qquad \varphi(p_3) = \exp\left(-\frac{1}{2}\eta\sigma_3\right)\xi$$

Eliminant $\xi$ entre ces deux équations permet de relier $\varphi(p_3)$ et $\chi(p_3)$

$$\varphi(p_3) = \mathrm{e}^{-\eta\sigma_3}\,\chi(p_3) \tag{19.93}$$

Remarquant que

$$m\,\mathrm{e}^{-\eta\sigma_3} = m(I\cosh\eta - \sigma_3\sinh\eta) = E - \sigma_3 p_3$$

nous obtenons

$$\begin{aligned}(E - \sigma_3 p_3)\chi(p_3) &= m\varphi(p_3)\\ (E + \sigma_3 p_3)\varphi(p_3) &= m\chi(p_3)\end{aligned} \tag{19.94}$$

où $E = (\vec{p}^2 + m^2)^{1/2}$ est l'énergie relativiste et nous avons écrit simplement $E$ pour $EI$. Au lieu d'un boost suivant $\hat{x}_3$, nous aurions pu choisir un boost suivant une direction $\hat{p}$ arbitraire, $\vec{p} = p\hat{p}$, et (19.94) devient

$$\begin{aligned}(E - \vec{\sigma}\cdot\vec{p})\chi(\vec{p}) &= m\varphi(\vec{p})\\ (E + \vec{\sigma}\cdot\vec{p})\varphi(\vec{p}) &= m\chi(\vec{p})\end{aligned} \tag{19.95}$$

Récrivons maintenant (19.95) dans l'espace des coordonnées, en passant de $\chi(\vec{p})$ à $\chi(t,\vec{x})$ par une transformation de Fourier : la correspondance entre espace des coordonnées et espace des énergies-impulsions étant donnée par $E \to \mathrm{i}\partial_t$ et $\vec{p} \to -\mathrm{i}\vec{\nabla}$

$$\begin{aligned}\chi(t,\vec{x}) &= \int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(Et - \vec{p}\cdot\vec{x})}\chi(\vec{p})\\ \varphi(t,\vec{x}) &= \int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(Et - \vec{p}\cdot\vec{x})}\varphi(\vec{p})\end{aligned} \tag{19.96}$$

L'équation (19.95) devient dans l'espace des coordonnées

$$\begin{aligned}(\partial_t + \vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla})\chi(t,\vec{x}) + \mathrm{i}m\varphi(t,\vec{x}) &= 0\\ (\partial_t - \vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla})\varphi(t,\vec{x}) + \mathrm{i}m\chi(t,\vec{x}) &= 0\end{aligned} \tag{19.97}$$

En multipliant à gauche la première des équations (19.97) par $(\partial_t - \vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla})$ et la seconde par $(\partial_t + \vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla})$, on montre que les spineurs $\chi(t,\vec{x})$ et $\varphi(t,\vec{x})$ obéissent à l'équation de Klein-Gordon

$$(\partial^2 + m^2)\chi = (\partial^2 + m^2)\varphi = 0$$

L'équation (19.97) (ou sa version (19.95) dans l'espace des impulsions) n'est autre que *l'équation de Dirac*, même si elle est écrite pour l'instant de façon quelque peu inhabituelle. La version usuelle sera écrite d'ici peu, mais il nous faut d'abord expliquer le rôle crucial de l'inversion d'espace pour obtenir cette équation. Dans une inversion d'espace, $\vec{p} \to -\vec{p}$ et $\vec{\sigma} \to \vec{\sigma}$ : $\vec{\sigma}$ est un moment angulaire, et donc un pseudovecteur. L'examen du comportement de (19.95) dans une inversion d'espace nous permet de confirmer que cette inversion transforme un spineur de Weyl $\chi$ en un spineur de Weyl $\varphi$ et *vice versa*. Si nous voulons construire une théorie de particules de spin 1/2 décrivant un

ensemble d'états et aussi leurs transformés par inversion d'espace, ce qui est *a fortiori* nécessaire si la théorie doit être invariante par parité, alors le spineur $\psi$ décrivant ces particules doit contenir *les deux types de spineurs de Weyl* $\chi$ et $\varphi$. Autrement dit, $\psi$ doit avoir (au moins) quatre composantes

$$\psi = \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \\ \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \tag{19.98}$$

Le vecteur à quatre composantes $\psi$ est un *spineur de Dirac*.

Avant d'abandonner les spineurs de Weyl pour les spineurs de Dirac, il est utile d'ajouter quelques commentaires sur le cas de la masse nulle : si $m = 0$, *les spineurs* $\chi$ *et* $\varphi$ *se découplent*. On le voit directement sur (19.95) écrite pour $m = 0$

$$(I - \vec{\sigma} \cdot \hat{p})\chi(\vec{p}) = 0 \qquad (I + \vec{\sigma} \cdot \hat{p})\varphi(\vec{p}) = 0 \tag{19.99}$$

Les spineurs de Weyl de masse nulle sont des états propres de l'hélicité $\vec{\sigma}\cdot\hat{p}/2$ : en effet, pour un spin $1/2$, $\vec{\sigma} \cdot \hat{p}/2$ est bien la projection du moment angulaire sur la direction de l'impulsion. Le spineur de Weyl $\chi(\vec{p})$ correspond à une hélicité $\lambda = 1/2$ et $\varphi(\vec{p})$ à une hélicité $\lambda = -1/2$. Ceci est en accord avec les résultats du § 19.2.4 : une particule de masse nulle et de spin $1/2$ a deux états d'hélicité possibles, $\lambda = \pm 1/2$, et ces deux états ne peuvent être reliés par aucune transformation de Lorentz du groupe connexe. Autrement dit, $\chi$ et $\varphi$ décrivent des particules *différentes*, et si les neutrinos avaient une masse nulle, $\chi$ décrirait les antineutrinos et $\varphi$ les neutrinos, deux particules qui sont différentes. Comme la masse des neutrinos est non nulle, la situation est plus complexe et pas encore clarifiée aujourd'hui. Notons enfin que par analogie avec les photons, un état d'hélicité $\lambda = 1/2$ est appelé état polarisé circulairement à droite, et $\lambda = -1/2$ état polarisé circulairement à gauche.

Après cette digression sur le cas de la masse nulle, mettons l'équation de Dirac sous sa forme usuelle, en définissant les *matrices de Dirac* $4 \times 4$ $\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^i)$, ainsi que la matrice $\gamma_5 = \mathrm{i}\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \qquad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \qquad \gamma_5 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \tag{19.100}$$

On vérifie immédiatement (exercice 19.6.8) que (19.97) devient

$$\left( \mathrm{i}\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}\gamma^i \frac{\partial}{\partial x^i} - m \right) \psi = 0 \tag{19.101}$$

soit en notation quadri-dimensionnelle

$$\boxed{(\mathrm{i}\gamma^\mu \partial_\mu - m)\, \psi = (\mathrm{i}\not{\partial} - m)\psi = 0} \tag{19.102}$$

où nous avons introduit la notation $\partial\!\!\!/ = \gamma^\mu \partial_\mu$ et plus généralement $A\!\!\!/ = \gamma^\mu A_\mu$ pour un quadrivecteur $A^\mu$. La matrice $\gamma^0$ échange les spineurs $\chi$ et $\varphi$ et représente donc l'opération parité $\Pi$

$$\Pi \quad : \quad \psi \to \Pi\psi = \gamma^0 \psi$$

Les spineurs $\chi$ et $\varphi$ sont vecteurs propres de la matrice $\gamma_5$, respectivement avec les valeurs propres $\pm 1$. On dit que ces spineurs ont une *chiralité* positive ou négative. Dans le cas de la masse nulle, l'hélicité est identique à la chiralité. La représentation (19.102) où $\gamma_5$ est diagonale est, pour des raisons évidentes, appelée *représentation chirale*, ou aussi *base chirale*, ou encore *base de Weyl.* Elle est bien adaptée au cas de particules de haute énergie, où $E \gg m$, ce qui est "proche" du cas de la masse nulle. Les opérateurs

$$P_L = \frac{1}{2}(1 + \gamma_5) \qquad P_R = \frac{1}{2}(1 - \gamma_5)$$

sont les projecteurs sur les états de chiralité positive ($R$) et négative ($L$).

On vérifie par un calcul explicite que les matrices de Dirac obéissent aux relations d'anticommutation

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \tag{19.103}$$

Il suffit de le vérifier pour $\{\gamma^0, \gamma^1\}$ et $\{\gamma^1, \gamma^2\}$, les autres relations s'en déduisant par permutation circulaire (exercice 19.6.8). Les identités $\gamma^{\mu\dagger} = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0$ et $\{\gamma_5, \gamma^\mu\} = 0$ sont souvent utilisées. Lorsque l'on utilise la construction usuelle de l'équation de Dirac, il est nécessaire de vérifier sa covariance de Lorentz, mais nous n'avons aucun besoin de le faire ici puisque nous sommes partis de cette covariance pour la construire !

La représentation explicite (19.100) des matrices de Dirac n'est évidemment pas unique. Tout ensemble de matrices $\gamma'^\mu$ relié aux $\gamma^\mu$ par une transformation de similarité

$$\gamma^\mu \to \gamma'^\mu = \Omega\, \gamma^\mu\, \Omega^{-1}$$

fait aussi bien l'affaire. La représentation usuelle des matrices de Dirac est celle où $\gamma^0$ est diagonal

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \qquad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \qquad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \tag{19.104}$$

Cette représentation est bien adaptée au cas de particules de faible énergie, $(E - m) \ll m$, ou $v \ll 1$. On observera que les $\gamma^i$ de la *base de Dirac* (19.104) diffèrent par un signe moins des $\gamma^i$ de la base chirale.

### 19.3.2 Courant de de Dirac

Notre objectif est identique à celui du chapitre 8 : déterminer les combinaisons bilinéaires des spineurs $\chi$ et $\varphi$ qui obéissent à une équation de continuité.

Il est commode de récrire (19.97) en explicitant les composantes $\alpha = 1, 2$ des spineurs

$$\begin{aligned} \partial_t \chi_\alpha &= -\vec{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \vec{\nabla} \chi_\beta - \mathrm{i} m \varphi_\alpha \\ \partial_t \varphi_\alpha &= \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \vec{\nabla} \varphi_\beta - \mathrm{i} m \chi_\alpha \end{aligned} \tag{19.105}$$

Nous nous servirons également du complexe conjugué de ces deux équations

$$\begin{aligned} \partial_t \chi^*_\alpha &= -(\vec{\nabla} \chi^*_\beta) \cdot \vec{\sigma}_{\beta\alpha} + \mathrm{i} m \varphi^*_\alpha \\ \partial_t \varphi^*_\alpha &= (\vec{\nabla} \varphi^*_\beta) \cdot \vec{\sigma}_{\beta\alpha} + \mathrm{i} m \chi^*_\alpha \end{aligned}$$

où nous avons utilisé $\vec{\sigma}^*_{\alpha\beta} = \vec{\sigma}_{\beta\alpha}$. On en déduit

$$\begin{aligned} \partial_t (\chi^\dagger \chi) &= -\vec{\nabla} \cdot (\chi^\dagger \vec{\sigma} \chi) + \mathrm{i} m (\varphi^\dagger \chi - \chi^\dagger \varphi) \\ \partial_t (\varphi^\dagger \varphi) &= \vec{\nabla} \cdot (\varphi^\dagger \vec{\sigma} \varphi) + \mathrm{i} m (\varphi^\dagger \chi - \chi^\dagger \varphi) \end{aligned} \tag{19.106}$$

avec les notations

$$\chi^\dagger \chi = \sum_{\alpha=1}^{2} \chi^*_\alpha \chi_\alpha \qquad \chi^\dagger \vec{\sigma} \chi = \sum_{\alpha,\beta=1}^{2} \chi^*_\alpha \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \chi_\beta \tag{19.107}$$

L'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\jmath} = 0 \tag{19.108}$$

s'obtient en additionnant les deux équations (19.106) et en définissant

$$\begin{aligned} \rho &= \chi^\dagger \chi + \varphi^\dagger \varphi \\ \vec{\jmath} &= \chi^\dagger \vec{\sigma} \chi - \varphi^\dagger \vec{\sigma} \varphi \end{aligned} \tag{19.109}$$

Initialement, Dirac introduisit son équation en imposant la positivité de la densité, et notre définition (19.109) de $\rho$ satisfait à l'évidence cette propriété : $\rho \geq 0$. De plus, la densité comme le courant exhibent des propriétés remarquables.

(i) Ils ne contiennent pas de termes mélangeant les spineurs $\chi$ et $\varphi$, une propriété très importante pour les interactions électromagnétiques et plus encore pour les interactions électrofaibles.

(ii) Le courant $\vec{\jmath}$ ne contient pas de dérivées spatiales, contrairement au courant de Schrödinger.

On peut écrire (19.108) sous forme covariante de Lorentz en définissant un quadri-courant $j^\mu = (\rho, \vec{\jmath})$ qui vérifie $\partial^\mu j_\mu = 0$.

Les lois de transformation (19.89) et (19.91) des spineurs de Weyl

$$\chi \to \chi' = \mathrm{e}^{\eta(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})/2} \chi \qquad \varphi \to \varphi' = \mathrm{e}^{-\eta(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})/2} \varphi$$

impliquent que seules les combinaisons $\chi^\dagger\varphi$ et $\varphi^\dagger\chi$ sont invariantes de Lorentz. Ces combinaisons permettent de former des densités scalaire $S$ et pseudoscalaire $P$

$$\begin{aligned} S &= \chi^\dagger\varphi + \varphi^\dagger\chi \\ P &= \chi^\dagger\varphi - \varphi^\dagger\chi \end{aligned} \tag{19.110}$$

En effet, $S$ est invariant par construction dans une inversion d'espace qui échange $\varphi$ et $\chi$, alors que $P$ change de signe dans cette opération. De (19.89) et (19.91), on déduit la loi de transformation de $\rho$ dans un boost de rapidité $\eta$ suivant $\hat{n}$

$$\rho \to \rho' = \rho\, \cosh\eta + (\vec{\jmath}\cdot\hat{n})\sinh\eta \tag{19.111}$$

C'est bien la loi de transformation de la composante de temps d'un quadrivecteur.

Pour retrouver le formalisme usuel, il suffit de remarquer que $S$ peut s'écrire en fonction du spineur à 4 composantes $\psi$ (19.98)

$$S = \sum_{\alpha\beta} \psi^*_\alpha(\gamma_0)_{\alpha\beta}\psi_\beta = \psi^\dagger\gamma_0\psi$$

ce qui conduit à définir l'adjoint de Pauli $\overline{\psi}$ par

$$\overline{\psi}_\beta = \sum_\alpha \psi^*_\alpha(\gamma_0)_{\alpha\beta} \qquad\qquad \overline{\psi} = \psi^\dagger\gamma_0 \tag{19.112}$$

Avec cette notation, $S = \overline{\psi}\psi$ et $P = \overline{\psi}\gamma_5\psi$. Il est immédiat de récrire le courant de Dirac sous la forme standard

$$\boxed{j^\mu = \overline{\psi}\gamma^\mu\psi} \tag{19.113}$$

Les quantités $\overline{\psi}\psi$, $\overline{\psi}\gamma^\mu\psi$ ou $\overline{\psi}\gamma_5\psi$ sont appelées *bilinéaires de Dirac* : nous en verrons d'autres exemples un peu plus loin.

### 19.3.3 Courant de Dirac en présence d'un champ électromagnétique

Pour obtenir le courant de Dirac en présence d'un champ électromagnétique *classique* $A^\mu = (A^0, A^i) = (V, \vec{A})$, nous utilisons la prescription du couplage minimal

$$-\mathrm{i}\partial_\mu \to -\mathrm{i}\partial_\mu + qA_\mu \tag{19.114}$$

où $q$ est la charge électrique de la particule de Dirac. Le signe $(+)$ devant $qA_\mu$ s'explique ainsi : la prescription pour l'équation de Schrödinger est

$$-\mathrm{i}\vec{\nabla} \to -\mathrm{i}\vec{\nabla} - q\vec{A} \Longrightarrow -\mathrm{i}\partial_l \to -\mathrm{i}\partial_l + qA_l$$

car $A_l = -A^l$. En terme du moment conjugué $\Pi$, la prescription est

$$P^\mu \to \Pi^\mu = P^\mu - qA^\mu \tag{19.115}$$

L'équation de Dirac en présence d'un champ électromagnétique s'écrit finalement

$$\gamma^\mu \left(\mathrm{i}\partial_\mu - qA_\mu\right)\psi = (\mathrm{i}\gamma^\mu D_\mu)\psi = m\psi \tag{19.116}$$

où

$$D_\mu = \partial_\mu + \mathrm{i}qA_\mu \tag{19.117}$$

est la forme quadri-dimensionnelle de la dérivée covariante. On vérifie que le transformé $\psi'$ de $\psi$ dans une transformation de jauge locale

$$\psi(x) \to \psi'(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\lambda(x)}\,\psi(x) \tag{19.118}$$

obéit à l'équation de Dirac (19.117) à condition d'effectuer sur le potentiel la transformation de jauge

$$A_\mu(x) \to A'_\mu(x) = A_\mu(x) + \partial_\mu\lambda(x) \tag{19.119}$$

Comme le courant de Dirac ne contient pas de dérivées, *il ne dépend pas des potentiels*, contrairement à celui de Schrödinger. Il sera commode pour ce qui suit de récrire l'équation de Dirac (19.116) en utilisant les spineurs de Weyl. D'après (19.115), le moment conjugué $\Pi^\mu$ est donné par (attention aux signes et on remarque que dans ce chapitre le potentiel électrique est noté $V$, et non $\overline{V}$ !)

$$\Pi^\mu = D^\mu \qquad (\Pi^0, \vec{\Pi}) = (\mathrm{i}\partial_t - qV, -\mathrm{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}) \tag{19.120}$$

Nous obtenons de (19.95)

$$\begin{aligned}(\Pi^0 - \vec{\sigma}\cdot\vec{\Pi})\chi &= m\varphi \\ (\Pi^0 + \vec{\sigma}\cdot\vec{\Pi})\varphi &= m\chi\end{aligned} \tag{19.121}$$

Nous allons utiliser ces équations pour calculer le moment magnétique d'une particule de Dirac chargée. Nous avons vu que l'invariance galiléenne imposait un facteur gyromagnétique $\gamma = q/m$ pour une particule de spin $1/2$, et nous allons retrouver ce résultat (heureusement, car sinon il y aurait une sérieuse contradiction !) dans le cas de l'équation de Dirac.

Pour comparer avec le cas galiléen, examinons la limite non relativiste de l'équation de Dirac, lorsque la vitesse $v$ de la particule est faible par rapport à celle de la lumière : $v \ll 1$, soit encore $\overline{p}/m \ll 1$, où $\overline{p}$ désigne une impulsion typique. Comme dans ce cas $\Pi^0 \simeq m$ et $\vec{\sigma}\cdot\vec{\Pi} \sim \overline{p}$, l'équation(19.121) montre que $\varphi \simeq \chi$, ce qui nous conduit à définir les combinaisons des spineurs de Weyl

$$\tilde{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi + \varphi) \qquad \tilde{\Phi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi - \varphi) \tag{19.122}$$

Nous nous attendons à ce $|\tilde{\Phi}| \ll |\tilde{\Psi}|$ lorsque $v \ll 1$ : $\tilde{\Psi}$ est la “grande composante” et $\tilde{\Phi}$ la “petite composante” du spineur de Dirac. En termes de ces spineurs, l'équation(19.121) devient, sans approximations

$$\Pi^0\tilde{\Psi} - (\vec{\sigma}\cdot\vec{\Pi})\tilde{\Phi} = m\tilde{\Psi}$$
$$\Pi^0\tilde{\Phi} - (\vec{\sigma}\cdot\vec{\Pi})\tilde{\Psi} = -m\tilde{\Phi}$$

Une façon un peu plus directe de déduire ces équations couplées, vérifiées par les grandes et petites composantes, consiste à utiliser la représentation usuelle (19.104) des matrices de Dirac : exercice 19.6.8. Pour une particule au repos et en l'absence de champ extérieur, $\Pi_0 = \mathrm{i}\partial_t, \vec{\Pi} = 0$ ; $\tilde{\Psi}$ et $\tilde{\Phi}$ sont alors proportionnels à $\exp(-\mathrm{i}mt)$. Afin d'éliminer cette dépendance rapide en temps, ce qui revient à prendre la masse comme zéro d'énergie, nous définissons

$$\tilde{\Psi} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}mt}\,\Psi \qquad\qquad \tilde{\Phi} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}mt}\,\Phi$$

ce qui transforme les équations précédentes en

$$\begin{aligned}\Pi^0\Psi - (\vec{\sigma}\cdot\vec{\Pi})\Phi &= 0\\ \Pi^0\Phi - (\vec{\sigma}\cdot\vec{\Pi})\Psi &= -2m\Phi\end{aligned} \tag{19.123}$$

Comme $\Pi^0 \simeq E - m \ll m$, $|\Pi^0\Phi| \ll m|\Phi|$ et nous pouvons écrire

$$\Phi \simeq \frac{1}{2m}\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{\Pi})\Psi \tag{19.124}$$

En éliminant $\Phi$ de (19.123), nous obtenons l'équation suivante pour $\Psi$

$$\left(\Pi^0 - \frac{1}{2m}\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{\Pi})^2\right)\Psi = 0$$

Si le champ électromagnétique se réduit à un champ magnétique : $V = 0$, alors $\Pi^0 = P^0 = \mathrm{i}\partial_t$ et l'équation pour $\Psi$ devient

$$\mathrm{i}\partial_t\Psi = \frac{1}{2m}\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{\Pi})^2\Psi = \frac{1}{2m}\,[\vec{\sigma}\cdot(\vec{P} - q\vec{A})]^2\Psi$$

ce qui montre que la limite non relativiste du hamiltonien est donnée exactement par l'expression obtenue dans le cas galiléen.

$$H = \frac{1}{2m}\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{\Pi})^2 = \frac{1}{2m}\,[\vec{\sigma}\cdot(\vec{P} - q\vec{A})]^2 \tag{19.125}$$

On retrouve donc la valeur $\gamma = q/m$ du facteur gyromagnétique. La déduction de l'expression du courant est renvoyée à l'exercice 19.6.8, où l'on montre que

$$\vec{\jmath} = \frac{1}{2m}\left[\Psi^\dagger\vec{\Pi}\Psi + (\vec{\Pi}\Psi)^\dagger\Psi\right] + \frac{1}{2m}\vec{\nabla}\times(\Psi^\dagger\vec{\sigma}\Psi) \tag{19.126}$$

Ceci n'est autre que l'expression du courant de Schrödinger auquel s'ajoute un terme provenant du moment magnétique.

### 19.3.4 Le hamiltonien de structure fine

Nous avons obtenu la limite non relativiste de l'équation de Dirac au premier ordre en $v$ lorsque $v \ll 1$, et cette limite n'est autre que l'expression galiléenne que nous récrivons sous forme explicite

$$\mathrm{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\vec{\nabla} - q\vec{A})^2 - \frac{q}{2m}(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}) + qV\right]\Psi = H\Psi \tag{19.127}$$

$\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$ est le champ magnétique. Le petit paramètre qui permet de passer à l'approximation galiléenne est $\overline{p}/m$, où $\overline{p}$ est une valeur typique de l'impulsion, et le développement est en fait en puissances de $1/m$. L'équation (19.127) est valable à l'ordre $\overline{p}/m$, et nous nous intéressons maintenant à l'approximation d'ordre $(\overline{p}/m)^2$ qui nous permettra de déduire le hamiltonien de la structure fine. Il existe une méthode systématique pour effectuer ce développement à tous les ordres en $\overline{p}/m$, la méthode de Foldy-Wouthuysen, mais cette méthode est complexe et nous allons nous contenter d'une approche plus élémentaire pour aller jusqu'à l'ordre $(\overline{p}/m)^2$. Nous allons nous limiter au cas d'un champ électrique *statique* dérivant d'un potentiel indépendant du temps $V$, et donc $\vec{B} = 0$. La première remarque concerne la normalisation de la fonction d'onde : dans la théorie de Dirac, c'est la quantité

$$\int \mathrm{d}^3r\,\rho(t,\vec{x}) = \sum_\alpha \int \mathrm{d}^3r\,\left(|\Psi_\alpha|^2 + |\Phi_\alpha|^2\right)$$

qui doit être normalisée à l'unité. D'après (19.124) écrite avec $\vec{\Pi} = \vec{P}$ car nous sommes dans le cas $\vec{A} = 0$, la condition de normalisation s'écrit

$$\sum \int \mathrm{d}^3r\,\left(|\Psi|^2 + \frac{1}{4m^2}\Psi^\dagger \vec{P}^2\Psi\right) \tag{19.128}$$

Cette équation montre qu'à l'ordre $(\overline{p}/m)^2$, la relation entre le spineur de Dirac $\psi$ et le spineur $\Psi$ est

$$\psi \simeq \left(1 + \frac{\vec{P}^2}{8m^2}\right)\Psi \qquad \Psi \simeq \left(1 - \frac{\vec{P}^2}{8m^2}\right)\psi \tag{19.129}$$

La relation entre $\Psi$ et $\Phi$ doit maintenant être améliorée pour tenir compte des termes en $(\overline{p}/m)^2$. Posons

$$\Phi = \frac{1}{2m}\,\Omega\Psi + \Phi' \quad \text{avec} \quad \Omega = \vec{\sigma}\cdot\vec{P}$$

et utilisons la seconde des équations (19.123) pour déterminer $\Phi'$, compte tenu de $|\Pi^0| \ll m$

$$\Phi' = -\frac{1}{4m^2}\Pi^0\Omega\Psi$$

Pour mettre l'équation de Dirac sous la forme $H_{\text{eff}}\psi = E\psi$, nous utilisons la première des équations (19.123) et remarquons que $\Omega^2 = \vec{P}^2$ pour écrire

$$\Pi^0\Psi = \frac{1}{2m}\,\vec{P}^2\Psi - \frac{1}{4m^2}\,\Omega\Pi^0\Omega\Psi$$

ce qui est correct à l'ordre $(\overline{p}/m)^2$ inclus. Finalement, nous utilisons (19.129) pour passer de $\Psi$ à $\psi$

$$\Pi^0\left(1 - \frac{1}{8m^2}\,\vec{P}^2\right)\psi = \frac{1}{2m}\,\vec{P}^2\,\psi - \frac{1}{16m^3}\,\vec{P}^4\,\psi - \frac{1}{4m^2}\,\Omega\Pi^0\Omega\psi \qquad (19.130)$$

Dans cette situation statique, nous pouvons remplacer $\Pi^0$ par $E - qV$ et identifier le hamiltonien effectif à l'aide de $H_{\text{eff}}\psi = E\psi$ qui s'écrit

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= H_0 + \delta H \\ H_0 &= \frac{\vec{P}^2}{2m} + qV \\ \delta H &= \frac{1}{8m^2}\,\Pi^0\vec{P}^2 - \frac{1}{16m^3}\vec{P}^4 - \frac{1}{4m^2}\,\Omega\Pi^0\Omega \end{aligned} \qquad (19.131)$$

Dans $\delta H$, on peut utiliser l'approximation suivante pour $\Pi^0\psi$, correcte à l'ordre $(\overline{p}/m)^2$ pour $H_{\text{eff}}$

$$\Pi^0\psi = (E - qV)\psi = \frac{\vec{P}^2}{2m}\psi \qquad (19.132)$$

Pour exploiter cette équation et pouvoir remplacer $\Pi^0$ par $\vec{P}^2/2m$, il faut faire agir $\Pi^0$ à droite. Les deux termes contenant $\Pi^0$ sont, à un facteur $-1/4m^2$ près, $\Omega\Pi^0\Omega$ et $-\Pi^0\vec{P}^2/2$. Pour déplacer $\Pi^0$ vers la droite, nous écrivons

$$\begin{aligned} \Omega\Pi^0\Omega &= \Omega[\Pi^0, \Omega] + \vec{P}^2\Omega \\ -\frac{1}{2}\,\Pi^0\vec{P}^2 &= -\frac{1}{2}[\Pi^0, \vec{P}^2] - \frac{1}{2}\,\vec{P}^2\Pi^0 \end{aligned}$$

Comme $\Pi^0 = E - qV$, il suffit en fait de calculer les commutateurs avec $V$. Pour évaluer le premier terme, nous utilisons (3.49), $\Omega = -\mathrm{i}\sigma^l\partial_l$ et $[P_m, V] = -\mathrm{i}\partial_m V$

$$\begin{aligned} \Omega[V, \Omega]\psi &= \mathrm{i}\sigma_l\sigma_m\partial_l[V, \partial_m]\psi = (\delta_{lm} + \mathrm{i}\varepsilon_{lmp}\sigma_p)([\partial_l\partial_m V]\psi + [P_m, V][\partial_l\psi]) \\ &= (\nabla^2 V)\psi - (\vec{E}\cdot\vec{\nabla})\psi + \mathrm{i}\vec{\sigma}\cdot(\vec{E}\times\vec{\nabla})\psi \end{aligned}$$

où le champ électrique $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$. On obtient pour le second terme

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\,[V, \vec{P}^2]\psi &= -\frac{1}{2}\left\{\vec{P}\cdot[V, \vec{P}] + [V, \vec{P}]\cdot\vec{P}\right\}\psi \\ &= -\frac{1}{2}\,(\nabla^2 V)\psi + (\vec{E}\cdot\vec{\nabla})\psi \end{aligned}$$

L'addition des deux termes donne le résultat recherché

$$\Omega[V,\Omega] - \frac{1}{2}\,[V,\vec{P}^2] = \frac{1}{2}\nabla^2 V - \vec{\sigma}\cdot(\vec{E}\times\vec{P}) = -\frac{1}{2}\,\nabla\cdot\vec{E} - \vec{\sigma}\cdot(\vec{E}\times\vec{P})$$

Le résultat pour $\delta H$ à l'ordre $(\overline{p}/m)^2$ est finalement

$$\delta H = -\frac{\vec{P}^4}{8m^3} - \frac{q}{8m^2}\left[\vec{\nabla}\cdot\vec{E} + 2\vec{\sigma}\cdot(\vec{E}\times\vec{P})\right] \tag{19.133}$$

Le premier terme de (19.133) n'est autre que la correction d'ordre $(\overline{p}/m)^2$ à l'énergie cinétique

$$\sqrt{\vec{P}^2 + m^2} = m + \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{\vec{P}^4}{8m^3} + \cdots$$

Le second terme proportionnel à $\vec{\nabla}\cdot\vec{E} = \rho_{\rm ext}$, où $\rho_{\rm ext}$ est la densité de charge, est appelé *terme de Darwin*. Il n'est différent de zéro que dans la région d'espace où $\rho_{\rm ext} \neq 0$, et il est proportionnel à $\delta(\vec{r})$ pour une charge ponctuelle. Le dernier terme est le plus intéressant, c'est le couplage spin-orbite car

$$\vec{E}\times\vec{P} = -\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\vec{R}\times\vec{P} = -\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\vec{L} \tag{19.134}$$

où $\vec{L}$ est le moment angulaire orbital. Dans le cas d'une charge ponctuelle, $\rho_{\rm ext} = Zq\delta(\vec{r})$, le hamiltonien $\delta H$ prend la forme finale

$$\delta H = -\frac{\vec{P}^4}{8m^3} + \frac{Z\alpha}{8m^2}\,\delta(\vec{r}) + \frac{q}{4m^2}\,\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\vec{\sigma}\cdot\vec{L} \tag{19.135}$$

où $\alpha = q^2/(4\pi\varepsilon_0)$ est la constante de structure fine. Les 3 corrections relativistes : énergie cinétique, terme de Darwin et structure fine ont déjà été rencontrées au § 15.2.2 et à l'exercice 15.4.2.

### 19.3.5 L'atome d'hydrogène

L'expression (19.135) de $\delta H$ valable à l'ordre $(\overline{p}/m)^2$ donne en général un niveau d'approximation suffisant pour l'étude de la structure fine. Il est cependant possible de résoudre *exactement* l'équation de Dirac dans le potentiel coulombien d'une charge ponctuelle $Z|q|$. Nous allons partir d'une situation plus générale en étudiant l'équation de Dirac dans un champ électrique statique à symétrie sphérique dérivant d'un potentiel $V(r)$. Partons de la décomposition (19.122) ; comme nous recherchons une solution stationnaire d'énergie $E$, nous posons

$$\tilde{\Psi}(t,\vec{r}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et}\,\psi(\vec{r}) \qquad \tilde{\Phi}(t,\vec{r}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et}\,\phi(\vec{r}) \tag{19.136}$$

Les spineurs $\psi$ et $\phi$ sont respectivement les "grandes composantes" et les "petites composantes" du spineur de Dirac. En utilisant la représentation (19.104)

des matrices $\gamma^\mu$, l'équation de Dirac devient (on observera un changement de signe de $m$ par rapport à (19.95))

$$\begin{aligned}(E-m-qV)\psi &= (\vec{\sigma}\cdot\vec{P})\phi\\ (E+m-qV)\phi &= (\vec{\sigma}\cdot\vec{P})\psi\end{aligned} \tag{19.137}$$

Il ne faut pas confondre le spineur $\phi$ avec le spineur $\varphi$ utilisé précédemment. Comme $\vec{\sigma}\cdot\vec{P}$ est un scalaire pour les rotations, les équations (19.137) sont invariantes par une rotation simultanée des variables d'espace et de spin, mais non pour chacune de ces rotations séparément. Cela implique que le moment angulaire total $\vec{J}$

$$\vec{J} = \vec{L} + \frac{1}{2}\,\vec{\sigma} = \vec{L} + \vec{S} \tag{19.138}$$

est une quantité conservée, alors que le moment angulaire orbital $\vec{L} = \vec{R}\times\vec{P}$ et le spin $\vec{S}$ ne le sont pas. Dans une inversion d'espace, $(\vec{\sigma}\cdot\vec{P})$ change de signe : c'est un pseudoscalaire, ce qui implique que $\psi$ et $\phi$ sont de parité opposée. Dans une inversion d'espace, on a donc les lois de transformation

$$\psi \to \kappa\psi \qquad\qquad \phi \to -\kappa\phi \tag{19.139}$$

où $\kappa = \pm 1$ est la parité.

Ces considérations sont suffisantes pour déterminer la dépendance angulaire de $\psi$ et de $\phi$ ; en effet, pour une particule de spin 1/2 et de moment angulaire total $j$, le moment angulaire orbital $l$ a deux valeurs possibles, $l = j\pm 1/2$ correpondant à une parité $\kappa = (-1)^l$. *Par définition*, nous allons choisir la “grande composante” $\psi$ comme celle dont la parité est $\kappa = (-1)^l$, tandis que d'après (19.139), la “petite composante” $\phi$ a la parité opposée $\kappa = (-1)^{l+1}$. Notons que ces conventions ne comportent aucune approximation. Nous pouvons écrire $\psi$ en combinant une fonction d'onde orbitale et un vecteur d'état de spin grâce aux coefficients de Clebsch-Gordan (9.132)

$$\begin{aligned}\psi_{nljm}(\vec{r},s) &= \sum_{m_l,m_s} C^{l1/2}_{m_l m_s;jm}\langle \vec{r},s|nljmm_lm_s\rangle\\ &= \frac{\mathrm{i}}{r}F_{nlj}(r)\sum_{m_l,m_s} C^{l1/2}_{m_l m_s;jm} Y_l^{m-m_s}(\hat{r})\chi_{m_s}\end{aligned} \tag{19.140}$$

où $n$ est un nombre quantique radial, $Y_l^m$ un harmonique sphérique et $\chi$ un spineur de Pauli à deux composantes, $m_s = \pm 1/2$. Définissant la fonction d'onde couplée d'espace et de spin $\mathcal{Y}_l^{jm}(\hat{r})$ par

$$\psi_{nljm}(\vec{r},s) = \frac{\mathrm{i}}{r}\,F_{nlj}(r)\mathcal{Y}_l^{jm}(\hat{r})$$

nous écrivons $\mathcal{Y}_l^{jm}$ sous forme d'un spineur à deux composantes $m_s = +1/2$ (composante supérieure) et $m_s = -1/2$ (composante inférieure)

$$\mathcal{Y}_l^{jm} = \begin{pmatrix} C^{l1/2}_{m-1/2,1/2;jm} Y_l^{m-1/2}\\ C^{l1/2}_{m+1/2,-1/2;jm} Y_l^{m+1/2}\end{pmatrix} \tag{19.141}$$

Afin d'être complets, mais nous ne nous en servirons pas, nous donnons l'expression explicite de $\mathcal{Y}_l^{jm}$ pour $j = l \pm 1/2$ (exercice 9.7.18)

$$\mathcal{Y}_l^{l\pm 1/2,m} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l \pm m + 1/2}\, Y_l^{m-1/2} \\ \pm\sqrt{l \mp m + 1/2}\, Y_l^{m+1/2} \end{pmatrix}$$

Pour construire $\phi$, nous remarquons que $(\vec{\sigma} \cdot \hat{r})$ est un pseudoscalaire. Bien que $(\vec{\sigma} \cdot \hat{r})$ ne commute pas avec $\vec{L}$, pour une particule de spin $1/2$ le moment angulaire total et la parité définissent une valeur unique de $\vec{L}^2$, ce qui fait que

$$\phi = -f_{nlj}(r)(\vec{\sigma} \cdot \hat{r})\mathcal{Y}_{ljm}(\hat{r}) \tag{19.142}$$

possède toutes les propriétés requises de la "petite composante" associée à $\psi$ : son moment angulaire total est $j$ et sa parité opposée à celle de $\psi$.

Pour obtenir les équations différentielles couplées auxquelles obéissent les fonctions radiales $F$ et $f$, nous utilisons l'identité valable pour toute fonction radiale $h(r)$

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma} \cdot \vec{P})h(r)\mathcal{Y}(\hat{r}) &= (\vec{\sigma} \cdot \hat{r})^2(\vec{\sigma} \cdot \vec{P})h(r)\mathcal{Y}(\hat{r}) \\ &= (\vec{\sigma} \cdot \hat{r})[\hat{r} \cdot \vec{P} + \mathrm{i}\vec{\sigma} \cdot (\hat{r} \times \vec{P})]h(r)\mathcal{Y}(\hat{r}) \\ &= (\vec{\sigma} \cdot \hat{r}) \left[-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\mathrm{i}}{r}(\vec{\sigma} \cdot \vec{L})\right] h(r)\mathcal{Y}(\hat{r})\end{aligned} \tag{19.143}$$

$\hat{r} \cdot \vec{P} = -\mathrm{i}\partial/\partial r$ est la composante radiale[6] de $\vec{P}$. On peut exprimer $\vec{\sigma} \cdot \vec{L}$ en fonction de $j$ et de $l$

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{L} = j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}$$

soit

$$\begin{aligned}\vec{\sigma} \cdot \vec{L} &= j - \frac{1}{2} \qquad &\text{si} \;\; j = l + \frac{1}{2} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{L} &= -\left(j + \frac{3}{2}\right) \qquad &\text{si} \;\; j = l - \frac{1}{2}\end{aligned} \tag{19.144}$$

ce qui permet de remplacer $(\vec{\sigma} \cdot \vec{L})$ dans (19.143) par un nombre. Dans le cas $j = l + 1/2$, l'action de $(\vec{\sigma} \cdot \vec{P})$ sur les spineurs $\psi$ et $\phi$ s'écrit

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma} \cdot \vec{P})\psi &= (\vec{\sigma} \cdot \hat{r})\mathcal{Y}(\hat{r}) \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{j - 1/2}{r}\right) F(r) \\ (\vec{\sigma} \cdot \vec{P})\phi &= \mathrm{i}\mathcal{Y}(\hat{r}) \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{j + 3/2}{r}\right) f(r)\end{aligned} \tag{19.145}$$

6. Cet opérateur doit être manipulé avec précaution car, malgré les apparences, il n'est pas hermitien, ou plus exactement il n'est pas auto-adjoint : voir Messiah (1959), chapitre IX.

Ces équations se simplifient grâce à (19.137) et (19.143)

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{P})\psi = (E+m-qV)\phi = (E+m-qV)(\vec{\sigma}\cdot\hat{r})\mathcal{Y}f(r)$$

et une équation analogue pour $\phi$. On obtient finalement pour $j = l + 1/2$

$$\begin{aligned}(E-qV-m)F(r) &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{j+3/2}{r}\right)f(r)\\ (E-qV+m)f(r) &= -\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{j-1/2}{r}\right)F(r)\end{aligned} \tag{19.146}$$

tandis que pour $j = l - 1/2$, un calcul analogue donne

$$\begin{aligned}(E-qV-m)G(r) &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{j-1/2}{r}\right)g(r)\\ (E-qV+m)g(r) &= -\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{j+3/2}{r}\right)G(r)\end{aligned} \tag{19.147}$$

On remarque que (19.147) se déduit de (19.146) par la substitution $j \to -(j+1)$, et il suffit donc de résoudre l'un ou l'autre des deux systèmes.

Venons-en maintenant à un atome hydrogénoïde où le potentiel $V(r)$ est donné par

$$qV(r) = -\frac{Zq^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{Z\alpha}{r} \tag{19.148}$$

La méthode de résolution de ces équations suit de près celle utilisée dans le cas de l'atome d'hydrogène non relativiste. On pose

$$F(r) = r^{\nu}P(r)\mathrm{e}^{-\beta r} \qquad f(r) = r^{\nu}p(r)\mathrm{e}^{-\beta r} \tag{19.149}$$

Les constantes $\beta$ et $\nu$ contrôlent le comportement des fonctions $F$ et $f$ lorsque $r \to 0$ et $r \to \infty$ respectivement, pourvu que $P(r)$ et $p(r)$ soient des polynômes en $r$. Les équations (19.146) pour $j = l + 1/2$ deviennent

$$\begin{aligned}\left(E + \frac{Z\alpha}{r} - m\right)P(r) &= p'(r) - \beta p(r) + \frac{\nu}{r}\,p(r) + \frac{j+3/2}{r}\,p(r)\\ \left(E + \frac{Z\alpha}{r} + m\right)p(r) &= -P'(r) + \beta P(r) - \frac{\nu}{r}\,P(r) + \frac{j-1/2}{r}\,P(r)\end{aligned} \tag{19.150}$$

Si $P(r)$ et $p(r)$ sont bien des polynômes, à la limite $r \to \infty$, les termes dominants dans (19.150) sont

$$\begin{aligned}(E-m)P(r) &= -\beta p(r)\\ (E+m)p(r) &= \beta P(r)\end{aligned} \tag{19.151}$$

ce qui implique $\beta^2 = m^2 - E^2$. Pour que les fonctions d'onde soient normalisables, il faut que $\beta > 0$, et donc que $m > E$, soit $\beta = \sqrt{m^2 - E^2}$. Passons

maintenant au comportement pour $r \to 0$ ; les termes dominants sont

$$\begin{aligned} Z\alpha P(r) &= \left(\nu + j + \frac{3}{2}\right) p(r) \\ Z\alpha\, p(r) &= \left(-\nu + j - \frac{1}{2}\right) P(r) \end{aligned} \tag{19.152}$$

On en déduit l'équation du second degré pour $\nu$

$$\nu^2 + 2\nu - \left(j^2 + j - \frac{3}{4}\right) + (Z\alpha)^2 = 0$$

d'où l'expression de $\nu$

$$\nu = -1 \pm \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2} \tag{19.153}$$

Comme on doit respecter la condition $\nu > 0$ sous peine d'avoir une fonction d'onde non normalisable à l'origine, il faut choisir le signe + dans (19.153). De plus, pour que cette équation pour $\nu$ ait un sens, il faut que $Z\alpha$ ne soit pas trop grand, et en fait $Z\alpha < 1$ pour la valeur minimale $j = 1/2$ de $j$. À la limite non relativiste, $(Z\alpha) \ll 1$, on retrouve $\nu = l$.

Étant donné les valeurs de $\beta = \sqrt{m^2 - E^2}$ et de $\nu$ (19.153), on résout le problème en écrivant explicitement les polynômes $P(r)$ et $p(r)$

$$P(r) = \sum_n C_n r^n \qquad p(r) = \sum_n c_n r^n \tag{19.154}$$

d'où, en identifiant les coefficients de $r^n$

$$\begin{aligned} (E - m)C_n + \beta c_n &= \left(n + \nu + j + \frac{5}{2}\right) c_{n+1} - Z\alpha C_{n+1} \\ (E + m)c_n - \beta C_n &= -\left(n + \nu - j + \frac{3}{2}\right) C_{n+1} - Z\alpha c_{n+1} \end{aligned} \tag{19.155}$$

Pour que la fonction d'onde soit normalisable à l'infini, il est nécessaire que les séries (19.154) comportent un nombre fini de termes. Les valeurs propres de $E$ sont obtenues en exigeant que ces séries s'arrêtent pour une certaine valeur de $n$. Il est facile de voir que cette valeur doit être identique pour les deux séries. Supposons que la valeur maximale de $n$ pour les deux séries soit $n'$ : $C_n = c_n = 0\ \forall n > n'$. Pour $n = n'$, nous obtenons

$$(E - m)C_{n'} = -\beta c_{n'} \qquad (E + m)c_{n'} = \beta C_{n'}$$

de sorte que

$$C_{n'} = \sqrt{\frac{m + E}{m - E}}\, c_{n'}$$

Écrivons ensuite les relations de récurrence (19.155) pour $n = n' - 1$, multiplions la première par $\beta$ et la seconde par $(E - m)$ et ajoutons les en tenant compte de $\beta^2 = m^2 - E^2$. Le membre de gauche de l'addition s'annule et le résultat ne dépend plus que de $C_{n'}$ et $c_{n'}$. On exprime $C_{n'}$ en fonction de $c_{n'}$ et et on en déduit l'équation

$$\left(n' + \nu + j + \frac{3}{2}\right) c_{n'} - Z\alpha\sqrt{\frac{m+E}{m-E}} c_{n'} = -\left(n' + \nu - j + \frac{1}{2}\right) c_{n'} - Z\alpha\sqrt{\frac{m-E}{m+E}} c_{n'}$$

Par hypothèse $c_{n'} \neq 0$, et cette équation est en fait l'équation aux valeurs propres pour $E$ qui donne

$$Z\alpha E = \sqrt{m^2 - E^2}\,(n' + \nu + 1)$$

ce qui permet d'écrire le résultat final pour $E$ en fonction du nombre quantique radial $n' = 0, 1, 2, \cdots$ et de $\nu$ (19.153)

$$E = \frac{m}{\sqrt{1 + (Z\alpha)^2/(n' + \nu + 1)^2}} = m\left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n' + \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}\right)^2}\right]^{-1/2} \tag{19.156}$$

La solution pour le cas $j = l - 1/2$ s'obtient en effectuant la substitution $j \to -(j+1)$. Le résultat (19.156) dépend de $j$ par la seule combinaison $(j + 1/2)^2$, qui est inchangée dans la substitution $j \to -(j+1)$. *Les niveaux d'énergie pour un même moment angulaire total et des moments angulaires orbitaux (ou des parités) différents sont identiques.* Dans le cas des niveaux $n = 2$ de l'atome d'hydrogène, les sous-niveaux ${}^2p_{1/2}$ et ${}^2s_{1/2}$ ont la même énergie, tandis que le niveau ${}^2p_{3/2}$ en diffère par la structure fine. Cependant, l'expérience montre que les niveaux ${}^2p_{1/2}$ et ${}^2s_{1/2}$ ont des énergies legèrement différentes, en contradiction avec l'équation de Dirac. Cette différence d'énergie, de l'ordre de 10 % de la structure fine et appelée *déplacement Lamb*, ne peut s'expliquer que dans le cadre d'une théorie des champs quantiques, dans ce cas l'électrodynamique quantique.

Afin de comparer avec les résultats du chapitre 15, il est instructif de prendre la limite non-relativiste de (19.156) lorsque $Z\alpha \ll 1$. En développant (19.156) à l'ordre $(Z\alpha)^4$ inclus et en notant que $n'$ est relié au nombre quantique principal $n$ par $n' = n - j - 1/2$, on obtient pour $E$ à l'ordre $(Z\alpha)^4$

$$E - m = -m\,\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} + m\,\frac{(Z\alpha)^4}{2n^4}\left(-\frac{n}{j + 1/2} + \frac{3}{2}\right)$$

## 19.4 Symétries de l'équation de Dirac

### 19.4.1 Invariance de Lorentz

Étant donné que l'invariance de Lorentz nous a servi de guide pour construire l'équation de Dirac, nous nous contentons d'y revenir très brièvement. Définissons les matrices $4 \times 4$ antisymétriques $\sigma^{\mu\nu} = -\sigma^{\nu\mu}$ par

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{\mathrm{i}}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu] \qquad \sigma^{0i} = \mathrm{i}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma^{ij} = \varepsilon_{ijk}\begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix} \tag{19.157}$$

où nous avons donné la forme explicite de $\sigma^{0i}$ et $\sigma^{ij}$ dans la base de Dirac (voir l'exercice 19.6.10 pour la base chirale), et examinons leurs relations de commutation. On obtient par inspection

$$\begin{aligned} [\sigma^{12}, \sigma^{23}] &= 2\mathrm{i}\sigma^{31} \\ [\sigma^{12}, \sigma^{01}] &= 2\mathrm{i}\sigma^{01} \\ [\sigma^{01}, \sigma^{02}] &= -2\mathrm{i}\sigma^{12} \end{aligned} \tag{19.158}$$

les autres relations s'en déduisant par permutation circulaire. Si nous définissons les générateurs infinitésimaux des rotations $J_1$, $J_2$ et $J_3$ et des boosts $K_1$, $K_2$ et $K_3$ par

$$J_l = \frac{1}{4}\,\varepsilon_{ljk}\sigma^{jk} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sigma_l & 0 \\ 0 & \sigma_l \end{pmatrix} \qquad K_i = \frac{1}{2}\,\sigma^{0i} \tag{19.159}$$

nous obtenons de (19.158)

$$[J_l, J_m] = \mathrm{i}\varepsilon_{lmp}J_p \qquad [J_l, K_m] = \mathrm{i}\varepsilon_{lmp}K_p \qquad [K_l, K_m] = -\mathrm{i}\varepsilon_{lmp}K_p \tag{19.160}$$

c'est-à-dire très précisément les relations de commutation des générateurs infinitésimaux (19.47), ou algèbre de Lie du groupe de Lorentz ; on note, que, comme dans le § 19.2.2, les $J_i$ sont hermitiens mais non les $K_i$. L'ensemble $\{J_i, K_i\}$ forme une représentation de dimension 4 de l'algèbre de Lie du groupe de Lorentz, et comme il s'agit d'une représentation de dimension finie, les 6 générateurs infinitésimaux ne peuvent pas être tous hermitiens. La définition (19.159) s'écrit aussi, compte tenu de (19.45) et (19.46)

$$J^{\mu\nu} = -\frac{1}{2}\,\sigma^{\mu\nu} \tag{19.161}$$

Si une transformation de Lorentz $\Lambda$ s'écrit sous forme exponentielle en fonction des générateurs $I^{\mu\nu}$ définis en (19.53)

$$\Lambda = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{2}\,\omega_{\mu\nu}I^{\mu\nu}\right)$$

elle sera représentée dans l'espace des spineurs de Dirac par la matrice $4 \times 4$

$$S(\Lambda) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2}\,\omega_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}\right) \tag{19.162}$$

Examinons maintenant la loi de transformation d'un spineur de Dirac $\psi(x)$, en rappelant qu'une transformation de Lorentz agit sur un champ scalaire $\varphi(x)$ suivant la loi

$$\varphi'(x') = \varphi'(\Lambda x) = \varphi(x)$$

Une transformation de Lorentz $\Lambda$ agissant sur un spineur de Dirac $\psi(x)$ sera de la forme

$$\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x) \qquad x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}x^{\nu} \tag{19.163}$$

Le spineur $\psi'(x')$ obéit à l'équation

$$(\mathrm{i}\partial\!\!\!/' - m)\psi'(x') = 0 \qquad \partial'_{\mu} = (\Lambda^{-1})^{\nu}{}_{\mu}\partial_{\nu}$$

Les détails de la démonstration sont renvoyés à l'exercice 19.6.10.

### 19.4.2 Parité

Nous serons brefs sur ce sujet que nous avons déjà examiné. L'opération parité change le signe des composantes d'espace d'un quadrivecteur

$$x^{\mu} \to x'^{\mu} = (x^0, -\vec{x})$$

Utilisant la remarque qui suit l'équation (19.102), nous observons que le spineur de Dirac $\psi'(x')$ défini par

$$\psi'(x') = \eta\gamma^0\psi(x) \tag{19.164}$$

où $\eta$ est un facteur de phase sans importance physique, obéit à l'équation de Dirac

$$(\mathrm{i}\gamma^{\mu}\partial'_{\mu} - m)\psi'(x') = 0 \qquad \partial'_{\mu} = \partial/\partial x'^{\mu} = (\partial_t, -\vec{\nabla})$$

On déduit de ce qui précède les lois de transformation des bilinéaires de Dirac par transformation de Lorentz et parité

$$\begin{aligned}
\text{Scalaire} &: \ \overline{\psi}\,\psi \ (1)\\
\text{Vecteur} &: \ \overline{\psi}\,\gamma^{\mu}\psi \ (4)\\
\text{Tenseur antisymétrique} &: \ \overline{\psi}\,\sigma^{\mu\nu}\psi \ (6)\\
\text{Pseudovecteur} &: \ \overline{\psi}\,\gamma_5\gamma^{\mu}\psi \ (4)\\
\text{Pseudoscalaire} &: \ \overline{\psi}\,\gamma_5\psi \ (1)
\end{aligned}$$

Le chiffre entre parenthèses indique le nombre de composantes indépendantes. La liste ci-dessus est exhaustive : comme les matrices de Dirac sont des matrices $4 \times 4$, il existe au plus 16 bilinéaires indépendants.

### 19.4.3 Conjugaison de charge

Nous avons établi au § 19.3.3 la forme du couplage d'une particule de Dirac de charge $q$ à un champ électromagnétique $A_\mu$. Prenant le complexe conjugué de (19.116), nous obtenons

$$[\gamma^{\mu *}(\mathrm{i}\partial_\mu + qA_\mu) + m]\,\psi^* = 0$$

Les matrices $-\gamma^{\mu *}$ obéissent à l'algèbre de Dirac (19.103) et il doit donc exister une matrice $C\gamma^0$ (le facteur $\gamma^0$ est conventionnel) telle que

$$-\gamma^{\mu *} = (C\gamma^0)^{-1}\gamma^\mu(C\gamma^0)$$

Définissant le spineur conjugué de charge $\psi_c$ par

$$\psi_c = C\gamma^0\psi^* \tag{19.165}$$

nous obtenons pour $\psi_c$ l'équation

$$[\gamma^\mu(\mathrm{i}\partial_\mu + qA_\mu) - m]\,\psi_c = 0 \tag{19.166}$$

Cette équation montre que $\psi_c$ décrit une particule de Dirac de masse $m$ et de charge $-q$. Si $\psi$ décrit un électron, alors $\psi_c$ décrit un positron : une prédiction spectaculaire de l'équation de Dirac est l'existence d'antiparticules, de même masse que la particule et de charge opposée. Il reste à déterminer explicitement la matrice $C$. Il est commode de manipuler la définition précédente de $C\gamma^0$ en utilisant l'expression ci-dessus de $\gamma^{\mu *}$ et la relation $\gamma^{\mu\dagger} = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0$ pour en déduire le transposé de $\gamma^\mu$, $\gamma^{\mu T}$

$$\gamma^{\mu T} = -C^{-1}\gamma^\mu C \tag{19.167}$$

Aussi bien dans la base de Dirac (19.104) que dans la base chirale (19.100), la seule matrice $\gamma^i$ qui ne change pas de signe par transposition est $\gamma^2$ : $\gamma^{2^T} = \gamma^2$, en raison de $\sigma_2^T = -\sigma_2$. À un facteur de phase près que nous pouvons choisir égal à un, nous avons $C = C^{-1} = \gamma^2\gamma^0$ de sorte qu'en fin de compte la relation entre $\psi$ et $\psi_c$ est

$$\psi_c = \gamma^2\psi^* \tag{19.168}$$

Il est facile de se convaincre que le conjugué de charge d'un spineur de chiralité droite est un spineur de chiralité gauche et *vice versa* : en effet, compte tenu de ce que $\gamma_5$ est une matrice réelle, si $\psi$ est un vecteur propre de $\gamma_5$, $\gamma_5\psi = \pm\psi$, alors

$$\gamma_5\psi_c = \gamma_5\gamma^2\psi^* = -\gamma_2(\gamma_5\psi)^* = -\gamma^2(\pm\psi)^* = \mp\psi_c$$

Il est également immédiat de montrer que $\psi_c$ se transforme par une transformation de Lorentz comme un spineur de Dirac. On en déduit qu'une équation compatible avec l'invariance de Lorentz est

$$(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu)\psi = m\psi_c \tag{19.169}$$

Cette équation est celle d'un *spineur de Majorana*. En prenant le complexe conjugué de cette équation et en multipliant par $\gamma^2$, on vérifie immédiatement que $\partial^2\psi = -m^2\psi$, ce qui montre que $m$ est bien la masse de la particule décrite par $\psi$. Comme $\psi$ et $\psi_c$ portent des charges opposées, l'équation de Majorana (19.169) ne peut s'appliquer qu'à des particules électriquement neutres, et plus généralement à des particules qui sont leurs propres antiparticules. De plus, comme $\psi$ et $\psi_c$ ont des chiralités opposées et que $\partial\!\!\!/\psi$ a une chiralité opposée à celle de $\psi$, on constate que contrairement à l'équation de Dirac, l'équation de Majorana préserve la chiralité : tous les termes ont la même chiralité. Lorsque la masse est nulle, les équations de Dirac et de Majorana coïncident. Si $m \neq 0$, ce qui est le cas des neutrinos, on pourrait avoir soit des neutrinos de Dirac, soit des neutrinos de Majorana. La question reste aujourd'hui ouverte.

### 19.4.4 Inversion du temps

Dans l'annexe A2, nous avons montré que l'opérateur $\Theta$ qui effectue le renversement du sens du temps s'écrit comme le produit $\Theta = UK$ d'un opérateur unitaire $U$ et de l'opérateur $K$ de conjugaison complexe. Nous avons vu que $U = \eta\sigma_2$ pour un spin 1/2, où $\eta$ est un facteur de phase, et nous avons observé que $\Theta^2 = -1$, un résultat à l'origine de la dégénérescence de Kramers. Afin de faire le lien avec l'annexe A2, il est commode d'écrire l'équation de Dirac (19.102) sous une forme qui mette en évidence le hamiltonien. Multiplions (19.102) à gauche par $\gamma^0$, ce qui donne

$$\mathrm{i}\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} = H\psi(t) \qquad H = -\mathrm{i}\gamma^0\gamma^i\partial_i + \gamma^0 m \tag{19.170}$$

Posant $t' = -t$ et $\psi'(t') = \Theta\psi(t)$, nous voulons assurer l'invariance du hamiltonien

$$\Theta^{-1}H\Theta = H \Longrightarrow KU^{-1}HUK = H$$

Ceci implique

$$KU^{-1}\gamma^0 UK = \gamma^0 \quad \text{et} \quad KU^{-1}(\mathrm{i}\gamma^0\gamma^i)UK = \mathrm{i}\gamma^0\gamma^i$$

On en déduit les conditions sur $U$

$$U^{-1}\gamma^0 U = (\gamma^0)^* \qquad U^{-1}\gamma^i U = -(\gamma^i)^*$$

Dans la base de Dirac comme dans la base chirale, $\gamma^2$ est la seule matrice imaginaire, et on peut donc choisir dans les deux bases $U = \eta\gamma^1\gamma^3$, de sorte que

$$\psi'(t') = \eta\gamma^1\gamma^3 K\psi(t) \tag{19.171}$$

Dans les deux bases, $\gamma^1\gamma^3$ a la même expression

$$\gamma^1\gamma^3 = \mathrm{i}\begin{pmatrix}\sigma_2 & 0\\ 0 & \sigma_2\end{pmatrix} \tag{19.172}$$

Comme dans le cas des spineurs à deux composantes, le renversement du sens du temps multiplie les spineurs par un facteur $\mathrm{i}\sigma_2$, et comme dans le cas non-relativiste, $\Theta^2 = -1$.

## 19.5 Quantification du champ de Dirac

### 19.5.1 Ondes planes

Notre objectif est de généraliser au champ de Dirac la théorie non-relativiste de la section 14.3. Nous anticipons le fait que les particules de Dirac sont des fermions, ce qu'affirme le théorème spin-statistique. Toutefois, nous serons capables d'en dire plus : en effet, nous avions jusqu'à présent énoncé ce théorème sans démonstration, nous allons maintenant le prouver, du moins dans le cas particulier des particules de Dirac sans interactions.

Nous reprenons la procédure suivie précédemment pour le champ électromagnétique et les champs de bosons et de fermions non-relativistes en considérant au départ l'équation de Dirac comme une équation d'onde pour un champ *classique*. Il sera commode d'étudier en premier lieu les solutions de type onde plane de cette équation. Nous avons vu que le spineur de Dirac $\psi(x)$ qui, rappelons-le, est ici un champ classique, obéit à l'équation de Klein-Gordon $(\partial^2 + m^2)\psi = 0$. Les solutions de l'équation de Dirac peuvent donc s'écrire comme des superpositions linéaires d'ondes planes de la forme

$$\begin{aligned} &\psi_n(x) = w_n(\vec{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_n p\cdot x} \\ &p\cdot x = E_p t - \vec{p}\cdot\vec{x} \qquad E_p = \sqrt{p^2+m^2} > 0 \end{aligned} \tag{19.173}$$

avec $\varepsilon_n = \pm 1$. Le cas $\varepsilon_n = +1$ est celui des solutions d'énergie positive et $\varepsilon_n = -1$ celui des solutions d'énergie négative. En substituant (19.173) dans l'équation de Dirac, on obtient

$$\begin{aligned} (\not{p} - m)w_n(\vec{p}) = 0 \qquad \varepsilon_n = +1 \\ (\not{p} + m)w_n(\vec{p}) = 0 \qquad \varepsilon_n = -1 \end{aligned} \tag{19.174}$$

Si $\vec{p} = 0$, alors $\not{p} = m\gamma^0$ et on trouve dans la représentation de Dirac quatre solutions linéairement indépendantes

$$\begin{aligned} w_1 = \hat{u}^{(1)}(\vec{0}) = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix} \qquad w_2 = \hat{u}^{(2)}(\vec{0}) = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix} \\ w_3 = \hat{v}^{(1)}(\vec{0}) = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix} \qquad w_4 = \hat{v}^{(2)}(\vec{0}) = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix} \end{aligned} \tag{19.175}$$

Les spineurs $\hat{u}^{(r)}$ correspondent à des solutions d'énergie positive $\varepsilon_n = +1$ et les spineurs $\hat{v}^{(r)}$ à des solutions d'énergie négative $\varepsilon_n = -1$. Pour une valeur arbitraire de $\vec{p}$, nous observons que

$$(\not{p} - m)(\not{p} + m) = p^2 - m^2 = 0$$

de sorte que l'on peut écrire

$$\begin{aligned} u^{(r)}(\vec{p}) &= \mathcal{N}(\not{p} + m)\hat{u}^{(r)}(\vec{0}) \\ v^{(r)}(\vec{p}) &= -\mathcal{N}'(\not{p} - m)\hat{v}^{(r)}(\vec{0}) \end{aligned} \tag{19.176}$$

où $\mathcal{N}$ et $\mathcal{N}'$ sont des constantes de normalisation. Si l'on veut une forme explicite de ces solutions, il suffit d'écrire $\not{p}$ dans la base de Dirac

$$\not{p} = \begin{pmatrix} E_p & -\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ \vec{\sigma}\cdot\vec{p} & -E_p \end{pmatrix} \tag{19.177}$$

et d'introduire les deux spineurs de Pauli $\chi^{(1)}$ et $\chi^{(2)}$

$$\chi^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \chi^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{19.178}$$

On obtient alors les spineurs $u$ et $v$ sous la forme

$$\begin{aligned} \text{Énergie} > 0 \quad &: \quad u^{(r)}(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{2m(E_p + m)}} \begin{pmatrix} (E_p + m)\chi^{(r)} \\ (\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\chi^{(r)} \end{pmatrix} \\ \text{Énergie} < 0 \quad &: \quad v^{(r)}(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{2m(E_p + m)}} \begin{pmatrix} (\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\chi^{(r)} \\ \\ (E_p + m)\chi^{(r)} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{19.179}$$

Dans (19.179), la constante de normalisation a été fixée par $\mathcal{N} = \mathcal{N}' = [2m(E_p + m)]^{1/2}$ de telle sorte que

$$\begin{aligned} \overline{u}^{(r)}(\vec{p})\, u^{(s)}(\vec{p}) &= \delta_{rs} \\ \overline{v}^{(r)}(\vec{p})\, v^{(s)}(\vec{p}) &= -\delta_{rs} \\ \overline{u}^{(r)}(\vec{p})\, v^{(s)}(\vec{p}) &= 0 \end{aligned} \tag{19.180}$$

On remarquera le signe $(-)$ dans la normalisation des spineurs d'énergie négative $v$ : d'après (19.175), lorsque $\vec{p} = 0$, $\gamma^0 = +1$ pour les spineurs d'énergie positive, $\gamma^0 = -1$ pour les spineurs d'énergie négative, et ceci se généralise au cas $\vec{p} \neq 0$. En plus des relations d'orthogonalité (19.180), nous aurons besoin des relations de fermeture. Dans un référentiel où $\vec{p} = 0$, nous avons pour les spineurs d'énergie positive

$$\sum_{r=1}^{2} u_\alpha^{(r)}(\vec{0})\overline{u}_\beta^{(r)}(\vec{0}) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\gamma^0 + I)_{\alpha\beta}$$

et pour les spineurs d'énergie négative

$$-\sum_{r=1}^{2} v_\alpha^{(r)}(\vec{0})\overline{v}_\beta^{(r)}(\vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}_{\alpha\beta} = -\frac{1}{2}(\gamma^0 - I)_{\alpha\beta}$$

d'où pour $\vec{p} \neq 0$ (exercice 19.6.11)

$$\begin{aligned} \sum_{r=1}^{2} u_\alpha^{(r)}(\vec{p})\overline{u}_\beta^{(r)}(\vec{p}) &= \left(\frac{\not{p} + m}{2m}\right)_{\alpha\beta} = (\Lambda_+(\vec{p}))_{\alpha\beta} \\ -\sum_{r=1}^{2} v_\alpha^{(r)}(\vec{p})\overline{v}_\beta^{(r)}(\vec{p}) &= -\left(\frac{\not{p} - m}{2m}\right)_{\alpha\beta} = (\Lambda_-(\vec{p}))_{\alpha\beta} \end{aligned} \tag{19.181}$$

L'équation précédente définit deux pseudoprojecteurs $\Lambda_+(\vec{p})$ et $\Lambda_-(\vec{p})$ qui vérifient

$$\Lambda_+ + \Lambda_- = I \qquad \Lambda_+\Lambda_- = \Lambda_-\Lambda_+ = 0 \qquad \Lambda_\pm^2 = \Lambda_\pm \tag{19.182}$$

Si $\vec{p} = 0$, $\Lambda_+$ et $\Lambda_-$ sont hermitiens et sont effectivement des projecteurs. Ce n'est pas le cas lorsque $\vec{p} \neq 0$ car alors les $\Lambda_\pm$ ne sont plus hermitiens mais obéissent à

$$(\Lambda_\pm)^\dagger = \gamma^0 \Lambda_\pm \gamma^0$$

### 19.5.2 Champ de Dirac quantifié

La quantification du champ de Dirac procède par analogie avec celle du champ électromagnétique : le rôle des polarisations $\vec{e}_s(\vec{k})$ est joué par les spineurs de Dirac $u^{(r)}(\vec{p})$ et $v^{(r)}(\vec{p})$. Cependant, nous devons bien entendu tenir compte du caractère fermionique du champ de Dirac et nous inspirer également de la quantification du champ de fermions non-relativiste (section 14.3). Comme précédemment, nous adoptons une quantification des ondes planes dans une boîte de volume $\mathcal{V}$, ce volume auxiliaire devant disparaître de tout résultat physique. Pour une valeur de $\vec{p}$ donnée, nous avons 4 états de spin possibles, auxquels nous allons associer pour les énergies positives 4 opérateurs d'annihilation $b_r(\vec{p})$ et $d_r(\vec{p})$ et leurs hermitiens conjugués $b_r^\dagger(\vec{p})$ et $d_r^\dagger(\vec{p})$ pour les énergies négatives. Ces opérateurs obéissent aux relations *d'anticommutation* (rappelons qu'en raison du choix de la quantification dans une boîte, les valeurs des impulsions sont discrètes)

$$\begin{aligned} \{b_r(\vec{p}), b_s^\dagger(\vec{p}\,')\} &= \delta_{rs}\delta_{\vec{p},\vec{p}\,'}\, I \\ \{d_r(\vec{p}), d_s^\dagger(\vec{p}\,')\} &= \delta_{rs}\delta_{\vec{p},\vec{p}\,'}\, I \end{aligned} \tag{19.183}$$

tous les autres anticommutateurs étant nuls. La décomposition du champ $\psi(t, \vec{x})$ en ondes planes est juste un peu plus compliquée que celle de la

section 14.3

$$\begin{aligned}\psi_\alpha(t,\vec{x}) &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}\sum_{\vec{p},r}\Big[b_r(\vec{p})u_\alpha^{(r)}(\vec{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\cdot x} + d_r^\dagger(\vec{p})v_\alpha^{(r)}(\vec{p})\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}p\cdot x}\Big] \\ \overline{\psi}_\alpha(t,\vec{x}) &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}\sum_{\vec{p},r}\Big[b_r^\dagger(\vec{p})\overline{u}_\alpha^{(r)}(\vec{p})\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}p\cdot x} + d_r(\vec{p})\overline{v}_\alpha^{(r)}(\vec{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\cdot x}\Big]\end{aligned} \tag{19.184}$$

Les opérateurs d'annihilation $b_r(\vec{p})$ et $d_r(\vec{p})$ sont associés comme il se doit aux ondes planes d'énergie positive $\exp(-\mathrm{i}p\cdot x)$ et leurs hermitiens conjugués aux ondes planes d'énergie négative $\exp(\mathrm{i}p\cdot x)$ ; $\alpha$ est un indice de Dirac allant de 1 à 4, puisqu'un spineur de Dirac possède 4 composantes. On déduit de (19.184) l'anticommutateur à temps égaux de $\psi$ et $\overline{\psi}$

$$\{\psi_\alpha(t,\vec{x}),\overline{\psi}_\beta(t,\vec{x}')\} = \frac{1}{\mathcal{V}}\delta_{\alpha\beta}\sum_{\vec{p}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} = \delta_{\alpha\beta}\,\delta(\vec{x}-\vec{x}')\,I \tag{19.185}$$

qui généralise les relations d'anticommutation (14.55) du champ scalaire.

### 19.5.3 Hamiltonien du champ de Dirac

Afin de conclure cette section consacrée à la quantification du champ de Dirac, il reste à écrire l'expression du hamiltonien et celle de la charge électrique. L'équation de Dirac se déduit de la densité de Lagrangien $\mathcal{L}$

$$\mathcal{L}(x) = \overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\overrightarrow{\partial\!\!\!/} - m)\psi(x) = \overline{\psi}(x)(\mathrm{i}\overleftarrow{\partial\!\!\!/} - m)\psi(x) = \overline{\psi}(x)(\frac{\mathrm{i}}{2}\overleftrightarrow{\partial\!\!\!/} - m)\psi(x) \tag{19.186}$$

où l'équivalence des différentes formes de $\mathcal{L}$ résulte d'intégrations par parties dans l'expression de l'action $S = \int \mathrm{d}^4x\,\mathcal{L}(x)$. Le moment conjugué $\pi_\alpha$ se déduit des équations d'Euler-Lagrange

$$\pi_\alpha = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_0\psi_\alpha)} = \mathrm{i}\overline{\psi}_\beta\gamma^0_{\beta\alpha} = \mathrm{i}\psi^\dagger_\alpha \tag{19.187}$$

ce qui donne pour la densité de hamiltonien $\mathcal{H}$

$$\mathcal{H} = \sum_\alpha \pi_\alpha\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t} - \mathcal{L}$$

et pour le hamiltonien

$$H = \mathrm{i}\int \mathrm{d}^3x\,\overline{\psi}(x)\gamma^0\frac{\partial\psi(x)}{\partial t} \tag{19.188}$$

étant donné que $\mathcal{L} = 0$ si $\psi(x)$ obéit à l'équation de Dirac. Pour évaluer $H$ en fonction des opérateurs de création et d'annihilation, nous utilisons la relation de Parseval qui permet d'exprimer le produit scalaire des deux

fonctions $f(\vec{x})$ et $g(\vec{x})$ en fonction de leurs transformées de Fourier $\tilde{f}(\vec{p})$ et $\tilde{g}(\vec{p})$ (exercice 19.6.12)

$$\int \mathrm{d}^3x\, f(\vec{x})\, g(\vec{x}) = \sum_{\vec{p}} \tilde{f}(\vec{p})\, \tilde{g}(-\vec{p}) \tag{19.189}$$

Dans le cas qui nous concerne, les coefficients de Fourier de $\overline{\psi}(x)$ et de $\partial\psi(x)/\partial t$ sont respectivement

$$\begin{aligned} \overline{\psi}(t,\vec{p}) = & \quad \sum_r \left[ d_r(\vec{p})\overline{v}^{(r)}(\vec{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_p t} + b_r^\dagger(-\vec{p})\overline{u}^{(r)}(-\vec{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_p t}\right] \\ \frac{\partial}{\partial t}\psi(t,-\vec{p}) = & \quad -\mathrm{i}\sum_s \left[E_p[b_s(-\vec{p})u(s)(\vec{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_p t} - d_s^\dagger(-\vec{p})v^{(s)}(\vec{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_p t}\right] \end{aligned} \tag{19.190}$$

Pour calculer $H$, nous avons besoin des relations d'orthogonalité (exercice 19.6.10)

$$\begin{aligned} \overline{v}^{(r)}(\vec{p})\gamma^0 u^{(s)}(\vec{p}) = 0 \\ \overline{v}^{(r)}(\vec{p})\gamma^0 v^{(s)}(\vec{p}) = \overline{u}^{(r)}(\vec{p})\gamma^0 u^{(s)}(\vec{p}) = \delta_{rs} \end{aligned} \tag{19.191}$$

qui permettent d'exprimer $H$ en fonction des opérateurs de création et d'annihilation

$$H = \sum_{\vec{p},r} E_p \left[b_r^\dagger(\vec{p})b_r(\vec{p}) - d_r(\vec{p})d_r^\dagger(\vec{p})\right]$$

Si l'on veut que $H$ annule l'état du vide $|0\rangle$, $H|0\rangle = 0$, il faut mettre les opérateurs $d_r$ et $d_r^\dagger$ dans l'ordre normal $d_r^\dagger d_r$, ce qui est possible grâce aux relations d'anticommutation (19.183)

$$-d_r d_r^\dagger = -I + d_r^\dagger d_r$$

En définissant le zéro d'énergie de telle sorte que l'énergie du vide soit nulle, $H|0\rangle = 0$, on donne à $H$ sa forme finale

$$\boxed{H = \sum_{\vec{p},r} E_p \left[b_r^\dagger(\vec{p})b_r(\vec{p}) + d_r^\dagger(\vec{p})d_r(\vec{p})\right]} \tag{19.192}$$

Le point crucial dans le raisonnement ci-dessus est que nous avons dû utiliser les relations *d'anticommutation*. Avec des relations de commutation $[d_r, d_r^\dagger] = I$, nous aurions trouvé

$$-d_r d_r^\dagger = -I - d_r^\dagger d_r$$

et le hamiltonien n'aurait pas été borné inférieurement. Le résultat (19.192) peut être vu comme un cas particulier du théorème spin-statistique : il faut

utiliser pour les particules de spin $1/2$ des relations d'anticommutation, sinon l'énergie ne serait pas bornée inférieurement, et ces particules sont donc des fermions. L'autre partie du théorème spin-statistique concerne les particules de spin 0 ou 1 : dans ce cas, on montre qu'avec des relations d'anticommutation on pourrait construire des opérateurs représentant des quantités physiques qui ne commutent pas pour des séparations du genre espace, et violent donc la causalité relativiste : voir le chapitre 11, note 15. Pour les particules de spin 0 et 1, seules sont possibles les relations de commutation, et ces particules sont donc des bosons.

L'expression (19.192) se généralise aux composantes spatiales de l'énergie-impulsion, et on peut écrire pour l'opérateur énergie-impulsion qui est un quadrivecteur $P^\mu$

$$P^\mu = \sum_{\vec{p},r} p^\mu \left[ b_r^\dagger(\vec{p}) b_r(\vec{p}) + d_r^\dagger(\vec{p}) d_r(\vec{p}) \right] \tag{19.193}$$

Il est également immédiat d'écrire l'opérateur de charge $Q$ tel que la charge du vide soit nulle, $Q|0\rangle = 0$

$$Q = q \int \mathrm{d}^3x\, \overline{\psi}(x)\gamma^0\psi(x) = q \sum_{\vec{p},r} \left[ b_r^\dagger(\vec{p}) b_r(\vec{p}) - d_r^\dagger(\vec{p}) d_r(\vec{p}) \right] \tag{19.194}$$

Les équations (19.192) et (19.194) mettent en évidence l'interprétation physique des opérateurs $b_r$, $d_r$ et leurs hermitiens conjugués : $b_r^\dagger(\vec{p})$ crée une particule de charge $q$ dans un état de spin $r$ et d'impulsion $\vec{p}$, tandis que $d_r^\dagger(\vec{p})$ crée une particule de charge $-q$ dans un état de spin $r$ et d'impulsion $\vec{p}$. Si, par convention, la charge de la particule est $q$, $b_r^\dagger(\vec{p})$ crée une particule et $d_r^\dagger(\vec{p})$ crée une antiparticule. Le champ $\psi(x)$ crée une charge $-q$ *via* $d_r^\dagger(\vec{p})$ et détruit une charge $q$ *via* $b_r(\vec{p})$, tandis que le champ $\overline{\psi}(x)$ crée une charge $q$ *via* $b_r^\dagger(\vec{p})$ et détruit une charge $-q$ *via* $d_r(\vec{p})$. Les opérateurs $b_r^\dagger(\vec{p})\, b_r(\vec{p})$ sont des opérateurs nombre de particules de spin $r$ et d'impulsion $\vec{p}$, tandis que les opérateurs $d_r^\dagger(\vec{p})\, d_r(\vec{p})$ sont des opérateurs nombre d'antiparticules de spin $r$ et d'impulsion $\vec{p}$.

## 19.6 Exercices

### 19.6.1 Décomposition polaire d'une transformation de Lorentz

Soit $e_0$ le vecteur unitaire de genre temps de composantes $(1, \vec{0})$ dans une base donnée de l'espace de Minkowski, et $e_0'$ son transformé par $\Lambda$ : $e_0' = \Lambda e_0$.

**1.** Montrer que les coordonnées de $e_0'$ sont

$$e_0' = (\Lambda^0{}_0, \Lambda^1{}_0, \Lambda^2{}_0, \Lambda^3{}_0)$$

et par conséquent $\Lambda^0{}_0 = \cosh\eta$.

**2.** On définit le vecteur unitaire $\hat{n}$ par

$$\Lambda^i{}_0 = -\hat{n}^i \sinh\eta$$

Montrer que la transformation de Lorentz spéciale $S$ de rapidité $\eta$ et de direction $\hat{n}$ (voir (19.7)) vérifie $Se_0 = e'_0$. En déduire que $R = S^{-1}\Lambda$ est une rotation. On peut donc écrire $\Lambda$ comme le produit d'une transformation de Lorentz spéciale et d'une rotation : $\Lambda = SR$.

**3.** Pour montrer que cette décomposition est unique, supposons que $\Lambda = S'R'$, et donc $S' = SRR^{-1}$. Montrer que $S'e_0 = Se_0$ et en déduire que $S$ et $S'$ sont identiques.

### 19.6.2 Relations de commutation des $J^{\alpha\beta}$ et des $P^\mu$

En prenant $a$ infinitésimal, $a = \varepsilon$ et identifiant les coefficient de $\varepsilon_\alpha$ dans les deux membres de (19.41), montrer les relations de commutation

$$\mathrm{i}[J^{\alpha\beta}, P^\sigma] = g^{\sigma\beta}P^\alpha - g^{\sigma\alpha}P^\beta$$

### 19.6.3 Rotation de Thomas-Wigner et précession de Thomas

L'objectif de cet exercice est d'abord de montrer que le produit de deux transformations de Lorentz spéciales, ou boosts, de rapidités $\chi$ et $\eta$ suivant deux directions différentes est le produit d'un boost $S$ de rapidité $\zeta$ par une rotation $R$ d'angle $\phi_{\mathrm{TW}}$ autour d'un axe perpendiculaire au plan des deux boosts : c'est la rotation de Thomas-Wigner. Nous prendrons le premier boost $\Lambda_1$ de rapidité $\chi$ le long de $\hat{x}^1$ et le second $\Lambda_2$ de rapidité $\eta$ le long d'un axe $\hat{n}$ du plan $(\hat{x}^1, \hat{x}^2)$, faisant un angle $\theta$ avec $\hat{x}^1$

$$\Lambda = \Lambda_2(\eta, \hat{n})\Lambda_1(\chi, \hat{x}^1) = S(\zeta)R(\phi_{\mathrm{TW}})$$

Nous nous proposons de calculer $\zeta$ et $\phi_{\mathrm{TW}}$ en fonction des rapidités $\eta$, $\chi$ et de l'angle $\theta$ entre les directions des deux boosts.

Les questions **5** et **6** appliquent ces résultats à la *précession de Thomas* (§ 15.2.2). Toutefois, *on peut aborder directement ces deux dernières questions* avec des calculs plus simples, étant donné qu'il est possible de se limiter au cas où $\eta$ et $\chi$ diffèrent de façon infinitésimale, et où l'angle $\theta$ est petit.

**1.** Soit $\Lambda_2(\eta, \hat{n})$, une transformation de Lorentz spéciale (boost) de rapidité $\eta$ le long de la direction $\hat{n}$ du plan $(\hat{x}^1\hat{x}^2)$,

$$\hat{n} = \{\hat{n}^1 = \cos\theta, \hat{n}^2 = \sin\theta, \hat{n}^3 = 0\}$$

écrite dans le point de vue passif. En utilisant (19.7), montrer que la matrice représentative de ce boost est

$$\Lambda_2 = \begin{pmatrix} \cosh\eta & -\sinh\eta\cos\theta & -\sinh\eta\sin\theta & 0 \\ -\sinh\eta\cos\theta & 1+(\cosh\eta-1)\cos^2\theta & (\cosh\eta-1)\sin\theta\cos\theta & 0 \\ -\sinh\eta\sin\theta & (\cosh\eta-1)\sin\theta\cos\theta & 1+(\cosh\eta-1)\sin^2\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

On remarquera (i) que $\Lambda_2$ est symétrique : $\Lambda_2^T = \Lambda_2$ comme il se doit pour un boost, (ii) qu'il suffit par la suite de considérer des matrices $3\times 3$ en écrivant

$$\Lambda_2 = \begin{pmatrix} \overline{\Lambda}_2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

**2.** On combine deux boosts, le premier $\Lambda_1$ de rapidité $\chi$ suivant $\hat{x}^1$ et le second donné par la question précédente. Le problème est de montrer que le produit

$$\Lambda = \Lambda_2\Lambda_1$$

des deux boosts est le produit $\Lambda = SR$ d'un boost $S$ par une rotation $R$ autour de $\hat{x}^3$, et de déterminer les paramètres des transformations $S$ et $R$ ; $R$ est la rotation de Thomas-Wigner. $S$ est un boost de rapidité $\zeta$ suivant un axe $\hat{k}$

$$\hat{k} = \{\hat{k}^1 = \cos\psi, \hat{k}^2 = \sin\psi, \hat{k}^3 = 0\}$$

dont l'expression matricielle se déduit de la question **1** par les substitutions $\eta \to \zeta$ et $\theta \to \psi$. Notre premier objectif est de déterminer les paramètres $\zeta$ et $\hat{k}$. Soit $e^{(0)}$ le quadrivecteur de composantes $(1,0,0,0)$. Ce vecteur n'est pas affecté par une rotation. En déduire

$$S^0{}_0 = \Lambda^0{}_0 = \cosh\zeta \qquad S^1{}_0 = \Lambda^1{}_0 = -\sinh\zeta\cos\psi \qquad S^2{}_0 = \Lambda^2{}_0 = -\sinh\zeta\cos\psi$$

En examinant l'expression de $S$, montrer de plus que

$$S^1{}_1 = 1 + \frac{(\Lambda^1{}_0)^2}{1+\cosh\zeta} \qquad\qquad S^2{}_2 = \frac{\Lambda^1{}_0\Lambda^2{}_0}{1+\cosh\zeta}$$

**3.** Pour obtenir l'angle $\phi_{\rm TW}$ de la rotation de Thomas-Wigner autour de $\hat{x}^3$, on examine la transformation du quadrivecteur $e^{(1)} = (0,1,0,0)$ et on calcule les produits scalaires

$$[S^{-1}\Lambda_2\Lambda_1]\, e^{(1)}\cdot e^{(1)} = [\Lambda]\, e^{(1)}\cdot [S]\, e^{(1)}$$

Montrer que

$$\cos\phi_{\rm TW} = -[\Lambda]\, e^{(1)}\cdot[S]\, e^{(1)} = -\Lambda^0{}_1\Lambda^1{}_0 + \Lambda^1{}_1\left(1+\frac{(\Lambda^1{}_0)^2}{1+\cosh\zeta}\right) + \Lambda^2{}_1\frac{\Lambda^1{}_0\Lambda^2{}_0}{1+\cosh\zeta}$$

En utilisant (19.14), montrer

$$-\Lambda^0{}_0\Lambda^0{}_1 + \Lambda^1{}_0\Lambda^1{}_1 + \Lambda^2{}_0\Lambda^2{}_1 = 0$$

ce qui permet de simplifier l'expression de $\cos\phi_{\rm TW}$

$$\cos\phi_{\rm TW} = \Lambda^1{}_1 - \frac{\Lambda^1{}_0\Lambda^0{}_1}{1+\cosh\zeta}$$

**4.** Pour calculer les quatre éléments de matrice $\Lambda^\mu{}_\nu$ nécessaires, il est commode de poser

$$c_1 = \cosh\chi \qquad s_1 = \sinh\chi$$
$$c_2 = \cosh\eta \qquad s_2 = \sinh\eta$$

Montrer que

$$\begin{aligned}
\Lambda^0{}_0 &= \cosh\zeta = c_1c_2 + s_1s_2\cos\theta \\
\Lambda^1{}_0 &= -s_2c_1\cos\theta - s_1[1+(c_2-1)\cos^2\theta] \\
\Lambda^0{}_1 &= -s_1c_2 - c_1s_2\cos\theta \\
\Lambda^1{}_1 &= s_1s_2\cos\theta + c_1[1+(c_2-1)\cos^2\theta]
\end{aligned}$$

En déduire

$$\cos\phi_{\rm TW} = 1 - \frac{(c_1-1)(c_2-1)}{1+\cosh\zeta}\sin^2\theta$$

Calculer le sinus de l'angle de rotation à l'aide de

$$\sin\phi_{\rm TW} = R\,e^{(1)}\cdot e^{(2)} = \Lambda_2\Lambda_1\,e^{(1)}\cdot S\,e^{(2)})$$

où $e^{(2)} = (0,0,1,0)$ et montrer que

$$\sin\phi_{\rm TW} = -\frac{\sin\theta}{1+\cosh\zeta}[s_1s_2 + (c_1-1)(c_2-1)\cos\theta]$$

**5.** On s'intéresse maintenant au cas où le second boost diffère du premier de façon infintésimale : $\eta = \chi+\varepsilon,\ |\varepsilon| \ll 1$ et $|\theta| \ll 1$. Il suffira de se limiter au premier ordre en $\varepsilon$ et $\theta$. La vitesse du premier boost est $\vec{v} = \hat{x}^1\tanh\chi$ et celle du second

$$\vec{v} + \delta\vec{v} = \hat{n}\tanh(\chi+\varepsilon)$$

Montrer que les composantes $\delta v^1$ et $\delta v^2$ de $\delta\vec{v}$ sont

$$\delta v^1 \simeq \frac{\varepsilon}{\cosh^2\chi} \qquad \delta v^2 \simeq \theta\tanh\chi$$

Au lieu du produit $\Lambda_2\Lambda_1$, on considère $\Lambda = \Lambda_2\Lambda_1^{-1}$. Posant $c = \cosh\chi$ et $s = \sinh\chi$, effectuer le produit $\Lambda_2\Lambda_1^{-1}$ en utilisant

$$\cosh(\chi+\varepsilon) \simeq c + \varepsilon s \qquad \sinh(\chi+\varepsilon) \simeq s + \varepsilon c \qquad \sin\theta \simeq \theta$$

$$\Lambda_2\Lambda_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & -s\theta \\ -\varepsilon & 1 & (c-1)\theta \\ -s\theta & -(c-1)\theta & 1 \end{pmatrix}$$

Vérifier ce résultat en prenant la limite de ceux de la question **4**. En comparant à (19.53), montrer que $\Lambda_2\Lambda_1^{-1}$ se décompose en deux boosts infinitésimaux de rapidité $\varepsilon$ le long de $\hat{x}^1$ et $s\theta$ le long de $\hat{x}^2$ et d'une rotation d'angle $\delta\phi_{\text{TW}} = (c-1)\theta$ autour de l'axe $\hat{x}^3$.

**6.** *Précession de Thomas.* Montrer que la rotation de Thomas-Wigner peut s'écrire en fonction des vitesses sous forme vectorielle

$$\vec{\delta}\phi_{\text{TW}} = \frac{c^2}{c+1}\,\vec{v}\times\vec{\delta}v \qquad c = \cosh\chi = 1/\sqrt{1-v^2}$$

Rappelons un résultat de mécanique classique : la variation d'un vecteur $\vec{G}$ dans un référentiel en rotation avec la vitesse angulaire $\vec{\omega}$ est

$$\frac{\mathrm{d}\vec{G}}{\mathrm{d}t} = \left.\frac{\mathrm{d}\vec{G}}{\mathrm{d}t}\right|_{\text{ref. propre}} + \vec{\omega}\times\vec{G}$$

Les référentiels propres de l'électron en rotation autour du noyau atomique sont définis par les *boosts* (en l'absence de toute de rotation !) faisant passer du référentiel du laboratoire $\mathcal{R}$ aux référentiels propres $\mathcal{R}'$ et $\mathcal{R}''$

$$x' = \Lambda_1(\chi,\hat{x}^1)x \qquad x'' = \Lambda_2(\chi+\varepsilon,\hat{n})x$$

L'évolution du référentiel propre $\mathcal{R}'$ vers le référentiel propre $\mathcal{R}''$ entre $t$ et $t+\delta t$ est pilotée par le boost infinitésimal $S$ de la question **5**, soit $x''' = Sx'$. Utilisant le fait que $SR = RS$ pour des transformations infinitésimales, montrer que le passage du référentiel du laboratoire $\mathcal{R}$ à $\mathcal{R}'''$ s'écrit

$$x''' = R(-\delta\phi_{\text{TW}})\Lambda_2(\chi+\varepsilon,\hat{n})x$$

Le référentiel $\mathcal{R}'''$ a donc tourné d'un angle $-\delta\phi_{\text{TW}}$. Montrer que la vitesse angulaire de précession est

$$\vec{\omega} = \frac{c^2}{c+1}\,\vec{a}\times\vec{v}$$

où $\vec{a}$ est l'accélération. Dans un calcul à tous les ordres en $v$, nous devrions tenir compte de

$$\left.\frac{\mathrm{d}\vec{G}}{\mathrm{d}t}\right|_{\text{ref. propre}} = \frac{1}{c}\,\frac{\mathrm{d}\vec{G}}{\mathrm{d}\tau}$$

où $\tau$ est le temps propre. Nous allons nous limiter au cas $v \ll 1$ et donc $\gamma \simeq 1$. Montrer que par conséquent

$$\delta\vec{\phi}_{\text{TW}} \simeq \frac{1}{2}\,\vec{v}\times\delta\vec{v}$$

et en déduire la vitesse angulaire de rotation

$$\vec{\omega} = -\lim_{\delta t\to 0}\frac{\delta\vec{\phi}_{\text{TW}}}{\delta t} = \frac{1}{2}\,\vec{a}\times\vec{v}$$

où $\vec{a}$ est l'accélération. D'après (15.17), l'électron voit dans son référentiel propre un champ magnétique

$$\vec{B} \simeq -\frac{1}{qm}\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right]\vec{l}$$

où $\vec{l}$ est le moment angulaire $\vec{l} = \vec{r}\times\vec{p}$. Si l'on prend pour simplifier un facteur gyromagnétique égal à $q/m$, montrer que l'équation du mouvement du spin $\vec{s}$ est

$$\frac{\mathrm{d}\vec{s}}{\mathrm{d}t} = \vec{s}\times\left[\frac{q}{m}\vec{B} - \vec{\omega}\right]$$

et l'énergie magnétique correspondante est

$$W_{\mathrm{so}} = -\left[\frac{q}{m}\vec{B} - \vec{\omega}\right]\cdot\vec{s}$$

En déduire le couplage spin-orbite

$$W_{\mathrm{so}} = \frac{1}{2m^2}\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right]\vec{l}\cdot\vec{s}$$

et justifier la valeur du hamiltonien de structure fine (15.20). La précession de Thomas a réduit $W_{\mathrm{so}}$ par un facteur 2.

### 19.6.4 Relation de commutation des $J_{\mu\nu}$ et des $W_\lambda$

**1.** Pour calculer le commutateur de $J_{\mu\nu}$ et de $W_\lambda$, on part de

$$\mathrm{i}[J_{\mu\nu}, W_\lambda] = -\frac{\mathrm{i}}{2}g_{\mu\alpha}g_{\nu\beta}[J^{\alpha\beta}, \varepsilon_{\lambda\sigma\tau\rho}J^{\sigma\tau}P^\rho]$$

Évaluer le commutateur

$$\begin{aligned} X &= \mathrm{i}g_{\mu\alpha}g_{\nu\beta}\varepsilon_{\lambda\sigma\tau\rho}[J^{\alpha\beta}, J^{\sigma\tau}P^\rho] \\ &= \mathrm{i}g_{\mu\alpha}g_{\nu\beta}\varepsilon_{\lambda\sigma\tau\rho}[J^{\alpha\beta}, J^{\sigma\tau}]P^\rho + \mathrm{i}g_{\mu\alpha}g_{\nu\beta}J^{\sigma\tau}\varepsilon_{\lambda\sigma\tau\rho}[J^{\alpha\beta}, P^\rho] = X_1 + X_2 \end{aligned}$$

Montrer que

$$\begin{aligned} X_1 &= 2[\varepsilon_{\lambda\nu\tau\rho}J_\mu{}^\tau P^\rho - \varepsilon_{\lambda\mu\tau\rho}J_\nu{}^\tau P^\rho] \\ X_2 &= \varepsilon_{\lambda\sigma\tau\nu}J^{\sigma\tau}P_\mu - \varepsilon_{\lambda\sigma\tau\mu}J^{\sigma\tau}P_\nu \end{aligned}$$

**2.** Pour évaluer $X_1$ et $X_2$, on examine deux cas de figure.
(i) $\mu \neq \nu \neq \lambda$ : les indices $\mu, \nu, \lambda$ sont tous différents.
(ii) $\mu = \lambda \neq \nu$ ; le cas où $\nu = \lambda$ se déduit en permutant les indices $\mu$ et $\nu$.
Montrer que dans le cas (i), $X_1 + X_2 = 0$ et que dans le cas (ii), on retrouve la seconde des équations (19.59).

### 19.6.5 Cas de la masse nulle

**1.** On écrit la transformation de $SL(2,\mathbb{C})$ d'un quadrivecteur $x \to x'$ sous la forme $\underline{x}' = A\underline{x}A^\dagger$, où la matrice $A \in SL(2,\mathbb{C})$ est donnée par (19.72) ; on rappelle

$$\underline{x} = \begin{pmatrix} x^+ & x^1 - \mathrm{i}x^2 \\ x^1 + \mathrm{i}x^2 & x^- \end{pmatrix} \qquad x^\pm = x^0 \pm x^3$$

Calculer $x'$ en prenant $z$ et $\phi$ infinitésimaux, $z = \varepsilon, |\varepsilon| \ll 1$. En déduire les transformés $x'^+$, $x'^1$ et $x'^2$ des coordonnées de $x$ ; on notera que $x'^- = x^-$.

**2.** Revenant aux coordonnées $x^0$ et $x^3$, démontrer (19.73) et (19.74).

**3.** Définissant les générateurs

$$C = K_1 + K_2 \qquad D = K_2 - J_1$$

montrer les relations de commutation

$$[J_3, C] = \mathrm{i}D \qquad [J_3, D] = -\mathrm{i}C$$

et en déduire

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_3}\, C\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta J_3} = C\cos\theta - D\sin\theta$$
$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_3}\, D\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta J_3} = D\cos\theta + C\sin\theta$$

Montrer que si C et D ont deux valeurs propres non nulles, alors ces valeurs propres forment un continuum, et donc que ces valeurs propres doivent être nulles.

### 19.6.6 Courant de Klein-Gordon

Vérifier la loi de conservation (19.85) du courant de Klein-Gordon.

### 19.6.7 Automorphismes de $SL(2,\mathbb{C})$

**1.** On s'intéresse d'abord à l'automorphisme $A \to (A^T)^{-1}$. Partant de la forme générale de $A$, avec $a$ et $\vec{b}$ complexes

$$A = a + \vec{\sigma}\cdot\vec{b} \qquad a^2 - \vec{b}^2 = 1$$

montrer que

$$(A^T)^{-1} = a - \sigma_1 b_1 + \sigma_2 b_2 - \sigma_3 b_3$$

Calculer ensuite $\zeta\sigma_i\zeta^{-1}$, où la matrice $\zeta$ est définie au § 19.3.1, et en déduire

$$(A^T)^{-1} = \zeta A \zeta^{-1}$$

**2.** Montrer qu'il n'existe pas de matrice $\overline{\zeta}$ telle que

$$(A^\dagger)^{-1} = \overline{\zeta} A \overline{\zeta}^{-1}$$

### 19.6.8 Équation de Dirac

**1.** Montrer que (19.101) se déduit des équations (19.97) pour $\chi$ et $\varphi$ et de la définition (19.98) du spineur de Dirac $\psi$ en fonction de $\chi$ et $\varphi$.

**2.** Vérifier les relations de commutation (19.103) des matrices de Dirac.

**3.** On utilise la représentation de Dirac (19.104) des matrices $\gamma^\mu$ et on écrit le spineur de Dirac sous la forme

$$\psi = \begin{pmatrix} \tilde{\Psi} \\ \tilde{\Phi} \end{pmatrix}$$

Montrer que l'on retrouve directement l'équation (19.123).

### 19.6.9 Courant de Dirac en présence d'un champ magnétique

**1.** Partant de l'expression $j^\mu = \overline{\psi}\gamma^\mu\psi$ du courant de Dirac, et utilisant la représentation de Dirac des matrices $\gamma^\mu$ comme dans l'exercice 19.6.8 question **3**, établir l'expression approchée (19.126) du courant de Dirac en présence d'un champ magnétique.

### 19.6.10 Transformation de Lorentz d'un spineur de Dirac

**1.** On se propose de montrer que l'équation

$$(\mathrm{i}\partial\!\!\!/' - m)\psi'(x') = 0$$

où $\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x)$, se déduit de $(\mathrm{i}\partial\!\!\!/ - m)\psi(x) = 0$. En utilisant la relation $\partial x^\nu/\partial x'^\mu = (\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu$, montrer que $\psi'(x')$ vérifie l'équation de Dirac pourvu que

$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda) = \Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu$$

**2.** On choisit $\Lambda$ voisine de l'identité

$$\Lambda^\mu{}_\nu = g^\mu{}_\nu + \varpi^\mu{}_\nu \qquad S(\Lambda) = I - \frac{\mathrm{i}}{4}\,\omega_{\alpha\beta}\sigma^{\alpha\beta}$$

avec $\omega_{\mu\nu} = g_{\mu\lambda}\varpi^\lambda{}_\nu$. Montrer que $\sigma_{\alpha\beta}$ doit obéir à

$$[\sigma_{\alpha\beta}, \gamma^\mu] = 2\mathrm{i}[g^{\mu\beta}\gamma^\alpha - g^{\mu\alpha}\gamma^\beta]$$

et vérifier que $\sigma^{\alpha\beta} = (\mathrm{i}/2)[\gamma^\alpha, \gamma^\beta]$ satisfait bien à cette relation de commutation. Calculer les matrices $\sigma^{\mu\nu}$ dans la base chirale.

### 19.6.11 Relations d'orthogonalité

**1.** Partant des expressions (19.176) de $u^{(r)}(\vec{0})$ et $v^{(r)}(\vec{0})$ et utilisant

$$\sum_{r=1}^{2} u_{\alpha}^{(r)}(\vec{0})\overline{u}_{\beta}^{(r)}(\vec{0}) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\gamma^0 + I)_{\alpha\beta}$$

$$-\sum_{r=1}^{2} v_{\alpha}^{(r)}(\vec{0})\overline{v}_{\beta}^{(r)}(\vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}_{\alpha\beta} = -\frac{1}{2}(\gamma^0 - I)_{\alpha\beta}$$

démontrer les relations de fermeture (19.181).

**2.** Montrer ensuite les relations d'orthogonalité (19.191).

### 19.6.12 Relation de Parseval

On se place pour simplifier à une dimension d'espace où la particule est confinée dans l'intervalle $[0, L]$. Les valeurs possibles de $k$ sont

$$k_n = \frac{2\pi n}{L} \qquad n = \ldots, -2, -1, 0, 1, 2, \ldots$$

On définit la transformée de Fourier $\tilde{f}(k)$ d'un fonction de $x$, $0 \le x \le L$ par

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_0^L \mathrm{d}x \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \, f(x)$$

Montrer que la transformation inverse est

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k \tilde{f}(k) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

En déduire la relation de Parseval

$$\int_0^L \mathrm{d}x \, f(x) g(x) = \sum_k \tilde{f}(k) \, \tilde{g}(-k)$$

La généralisation à trois dimensions est immédiate.

## 19.7 Bibliographie

Il existe de nombreux livre de relativité, parmi lesquels celui de Taylor et Wheeler [1963], Jackson [2001], chapitre 11 ou Gourgoulhon [2010]. La rotation de Thomas-Wigner est traitée dans Taylor et Wheeler [1963], exercice 103, Jackson [2001] chapitre 11, ou Gourgoulhon [2010], chapitre 6. Les représentations du groupe de Poincaré sont discutées dans Wightman [1960],

Gasiorowicz [1966], chapitre 4, Weinberg [1995], chapitre 2. Pour des compléments à l'équation de Dirac et la quantification du champ de Dirac, on pourra consulter Messiah [1959], chapitre XX, Itzykson et Zuber [1980], chapitre 2, Le Bellac [1988], chapitre XI, Abers [2004], chapitre 12 ou Zee [2010], chapitre 2. Ces références introduisent l'équation de Dirac en suivant l'approche historique ; le présent exposé s'inspire de Gottfried et Yan [2003], chapitre 13, qui utilisent les spineurs de Weyl.

# Chapitre 20

# Corrigés d'une sélection d'exercices

## 20.1 Exercices du chapitre 1

### 1.6.1 Ordres de grandeur

**1.** Il faut utiliser des particules dont la longueur d'onde $\lambda$ soit de 1 Å (= 0.1 nm) ou moins. On utilisera $\lambda = 1$ Å dans les calculs numériques. Pour les photons, cela donne une énergie en eV

$$E_{\text{phot}} = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^{8}}{10^{-10} \times 1.6 \times 10^{-19}} = 1.24 \times 10^{4}\,\text{eV} = 12.4\,\text{keV}$$

Pour les neutrons, on utilise $p = h/\lambda$, soit

$$E_{\text{neut}} = \frac{p^2}{2m_n} = \frac{h^2}{2m_n\lambda^2} = 8.2 \times 10^{-2}\,\text{eV} = 82\,\text{meV}$$

Cette énergie est de l'ordre de celle des neutrons thermiques qui vaut environ 25 meV. Pour les électrons, il suffit de multiplier le résultat précédent par le rapport des masses $m_n/m_e$

$$E_{\text{el}} = E_{\text{neut}}\frac{m_n}{m_e} = 151\,\text{eV}$$

**2.** La fréquence d'une onde sonore de vecteur d'onde $k = 1\,\text{nm}$ est $\omega = 5 \times 10^{12}\,\text{rad.s}^{-1}$ et l'énergie d'un phonon $\hbar\omega = 3.3\,\text{meV}$. Il est beaucoup plus facile de comparer expérimentalement une telle énergie à celle d'un neutron de quelques dizaines de meV qu'à celle d'un photon de 10 keV et de détecter la création d'un phonon. On utilisera donc de préférence des neutrons.

**3.** La masse d'une molécule de fullerène est $M = 1.2 \times 10^{-24}\,\text{kg}$ et sa longueur d'onde

$$\lambda = \frac{h}{mv} = 2.5 \times 10^{-12}\,\text{m}$$

Cette longueur d'onde est une fraction $\sim 1/300$ du diamètre de la molécule.

**4.** La distance de la masse $M_1$ au centre d'inertie de la molécule est

$$r_1 = \frac{M_2}{M_1 + M_2}\, r_0$$

et le moment d'inertie

$$I = M_1 r_1^2 + M_2 r_2^2 = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}\, r_0^2 = \mu r_0^2$$

L'énergie cinétique de rotation est, en fonction du moment angulaire $J = I\omega$

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2}\, I\omega^2 = \frac{J^2}{2I}$$

et pour $J = \hbar$, cela donne $\varepsilon_{\text{rot}} = \hbar^2/(2I)$

$$\varepsilon_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} = \frac{\hbar^2}{2\mu b^2 a_0^2} = \frac{m}{b^2 \mu}\, R_\infty$$

en utilisant $R_\infty = e^2/(2a_0)$ et $a_0 = \hbar^2/(me^2)$.

**5.** La constante élastique $K$ vaut

$$K = \frac{2cR_\infty}{b^2 a_0^2} = \frac{4cmR_\infty^2}{\hbar^2 b^2}$$

soit

$$\hbar\omega_v = 2\sqrt{\frac{c}{b^2}}\,\sqrt{\frac{m}{\mu}}\, R_\infty$$

Pour la molécule de HCl, on a $\mu = 0.97 m_p$ et $m/\mu = 5.6 \times 10^{-4}$. On en déduit $b = 2.4$ et $c = 1.75$ : ce sont bien des nombres voisins de l'unité.

**6.** La dimension de $G$ s'obtient aisément en remarquant que $Gm^2/r$ est une énergie. On trouve pour cette dimension $\mathcal{M}^{-1}\mathcal{L}^3\mathcal{T}^{-2}$. La quantité $\sqrt{\hbar c/G}$ a les dimensions d'une masse, ce qui donne pour l'énergie de Planck

$$E_P = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}}\, c^2 = 1.9 \times 10^9\,\text{J} = 1.2 \times 10^{19}\,\text{GeV}$$

et pour la longueur de Planck

$$l_P = \frac{\hbar}{c}\sqrt{\frac{G}{\hbar c}} = 1.6 \times 10^{-35}\,\text{m}$$

L'énergie de Planck est considérable par rapport aux énergies maximales atteintes en physique des particules élémentaires (environ 8 TeV= 8000 GeV, énergie atteinte aujourd'hui par le LHC au CERN), et par voie de conséquence la longueur de Planck est très petite par rapport aux distances actuellement explorées qui sont $\sim 10^{-18}\,$m.

### 1.6.4 Diffraction de neutrons par un cristal

**1.** L'onde incidente arrivant en $\vec{r}_i$ est déphasée de $\delta_{\rm inc} = \vec{k}\cdot\vec{r}_i$ par rapport à celle arrivant en $\vec{r}=0$, et l'onde diffractée de $\delta_{\rm diff} = -\vec{k}\,'\cdot\vec{r}_i$.

**2.** Le produit scalaire $\vec{q}\cdot\vec{r}_i$ vaut

$$\vec{q}\cdot\vec{r}_i = naq_x + mbq_y$$

En utilisant la sommation d'une série géométrique

$$\sum_{n=0}^{N-1} x^n = \frac{1-x^N}{1-x}$$

on évalue par exemple la somme

$$\Sigma_x = \sum_{n=0}^{N-1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q_x na} = \frac{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q_x aN}}{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q_x a}} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q_x a(N-1)/2}\,\frac{\sin q_x aN/2}{\sin q_x a/2}$$

d'où l'on déduit la fonction $F(aq_x, bq_y)$ de l'énoncé.

**3.** Supposons que $q_x$ diffère très peu de $2\pi n_x/a$, où $n_x$ est un entier : $q_x a = 2\pi n_x + \varepsilon$. Alors,

$$\begin{aligned}\sin\frac{q_x aN}{2} &= \sin\left[\pi n_x N + \varepsilon\frac{N}{2}\right] = \pm\sin\frac{\varepsilon N}{2}\\ \sin\frac{q_x a}{2} &= \sin\left[\pi n_x + \frac{1}{2}\,\varepsilon\right] = \pm\sin\frac{\varepsilon}{2}\end{aligned}$$

La largeur du pic est donc $\varepsilon \sim 1/N$ et sa hauteur est obtenue en prenant la limite $\varepsilon \to 0$

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\sin^2 \varepsilon N/2}{\sin^2 \varepsilon/2} = N^2$$

ce qui donne une intensité dans le pic $\sim N^2 \times 1/N = N$. Le même calcul se répète dans la direction $y$.

**4.** La condition de diffusion élastique est

$$\vec{k}^2 = \vec{k}\,'^2 = (\vec{k}+\vec{q})^2 = k^2 + 2\vec{q}\cdot\vec{k} + q^2$$

soit $q^2 + 2\vec{q}\cdot\vec{k} = 0$. Supposons que $n_x = 0$ (ou $q_x = 0$) et donc $k'_x = k_x$

$$k'_x = k_x \qquad k'_y = k_y - \frac{2\pi n_y}{b}$$

La condition de diffusion élastique est $|k'_y| = |k_y|$, ce qui implique

$$k_y = \frac{\pi n_y}{b} \qquad k'_y = -\frac{\pi n_y}{b}$$

Comme $k_y = k \sin\theta_B$, où $\theta_B$ est l'angle d'incidence, on devra avoir

$$\sin\theta_B = \frac{\pi n_y}{bk}$$

Il n'y a de solution que si $n_y$ est suffisamment petit ou $k$ suffisamment grand. S'il n'y avait que la première rangée d'atomes, il n'y aurait pas de condition sur $k_x$, car $k'_x$ ne serait pas lié à $k_x$ par $k'_x = k_x + q_x$. On obtiendrait alors des maxima de diffraction pour tout angle d'incidence.

**5.** La somme sur les mailles donne un facteur

$$\sum_{n=0}^{N-1}\sum_{m=0}^{M-1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(2aq_x n + 2bq_y m)} = F(2aq_x, 2bq_y)$$

tandis que l'amplitude de diffusion par la première maille est

$$f_1\Big(1 + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(aq_x + bq_y)}\Big) + f_2\Big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}aq_x} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}bq_y}\Big)$$

En raison de l'argument de la fonction $F$, la condition pour un pic de diffraction est

$$q_x = \frac{\pi n_x}{a} \qquad\qquad q_y = \frac{\pi n_y}{b}$$

et on en déduit

$$f = f_1\left[1 + (-1)^{n_x+n_y}\right] + f_2\left[(-1)^{n_x} + (-1)^{n_y}\right]$$

Le résultat final est

– $n_x$ et $n_y$ pairs : $f = 2(f_1 + f_2)$
– $n_x$ et $n_y$ impairs : $f = 2(f_1 - f_2)$
– $n_x$ pair et $n_y$ impair ou l'inverse : $f = 0$

**6.** Lorsque les sites sont occupés de façon indifférenciée par chaque type d'atome, la maille du réseau est $(a, b)$ et non $(2a, 2b)$ comme dans la question précédente. On a en fait $f_1 = f_2$ et on perd la moitié des pics de diffraction.

### 1.6.6 Interféromètre à neutrons et gravité

**1.** et **2.** Calculons les amplitudes de détection par $D_1$ et $D_2$

$$\begin{aligned} a_1 &= a_0 r^2 t\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} + 1\right) \\ a_2 &= a_0 r\left(t^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} + r^2\right) \end{aligned}$$

et en prenant les modules au carré

$$\begin{aligned} \mathsf{p}_1 &= A(1 + \cos\delta) \qquad\qquad A = 2|r^2 t|^2 \\ \mathsf{p}_2 &= B + A'\cos\delta \qquad\qquad A' = 2|r^2|\mathrm{Re}\left(t^2(r^*)^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\right) \end{aligned}$$

La somme $\mathsf{p}_1 + \mathsf{p}_2$ doit être indépendante de $\chi$, soit $A + A' = 0$, ou

$$\cos 2(\alpha - \beta) \cos \delta - \sin 2(\alpha - \beta) \sin \delta = - \cos \delta$$

et donc

$$\alpha - \beta = \frac{\pi}{2} \mod n\pi$$

**3.** À l'altitude, $z$, l'énergie du neutron est $K = K_0 + mgz$ si son énergie est $K_0$ pour $z = 0$. Son impulsion vaut

$$p = \sqrt{2mK} = \sqrt{2m(K_0 + mgz)} \simeq \sqrt{2mK_0} \left(1 + \frac{mgz}{2K_0}\right)$$

L'approximation est justifiée car, pour $z = 1\,\mathrm{m}$

$$mgz \simeq 10^{-7}\,\mathrm{eV} \ll K_0 \sim 0.1\,\mathrm{eV}$$

La variation $\Delta k$ du vecteur d'onde vaut

$$\Delta k = k\,\frac{mgz}{2K_0} \qquad \frac{\Delta k}{k} = \frac{mgz}{2K_0}$$

Sur un trajet de longueur $L$, le déphasage accumulé entre les deux bras, l'un à l'altitude $z$ et l'autre à l'altitude 0 est

$$\Delta\phi = \Delta k L = \frac{mgzLk}{2K_0} = \frac{mgk\mathcal{S}}{2K_0} = \frac{m^2 g\mathcal{S}}{\hbar^2 k}$$

car $zL$ est l'aire du losange et $2K_0 = \hbar^2 k^2/m$. Numériquement, $\Delta\phi = 0.59\,\mathrm{rad}$.

**4.** Il suffit de remplacer $z$ par $z\cos\theta$ dans les résultats précédents. Le déphasage devient

$$\chi = \Delta\phi = \frac{m^2 g\mathcal{S}}{\hbar^2 k} \cos\theta$$

et on observera donc des oscillations dans le taux de détection des neutrons en faisant varier $\theta$.

### 1.6.7 Diffusion cohérente et diffusion incohérente de neutrons par un cristal

**1.** On remarque que $\alpha_i^2 = \alpha_i$. Si $i = j$, $\langle\alpha_i^2\rangle = \langle\alpha_i\rangle = p_1$, tandis que si $i \neq j$

$$\langle\alpha_i\alpha_j\rangle = \langle\alpha_i\rangle\langle\alpha_j\rangle = p_1^2$$

les deux résultats se résumant en

$$\langle\alpha_i\alpha_j\rangle = \delta_{ij}p_1 + (1 - \delta_{ij})p_1^2 = p_1^2 + p_1 p_2 \delta_{ij}$$

**2.** La probabilité de diffusion par le cristal est

$$\begin{aligned}
\langle |f_{\rm tot}|^2\rangle &= \sum_{i,j}\Big\langle \big[\alpha_i f_1 + (1-\alpha_i)f_2\big]\big[\alpha_j f_1 + (1-\alpha_j)f_2\big]\Big\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot(\vec{r}_i-\vec{r}_j)} \\
&= \sum_{i,j}\big[(p_1^2 + p_1p_2\delta_{ij})f_1^2 + 2p_1p_2(1-\delta_{ij})f_1f_2 + (p_2^2+p_1p_2\delta_{ij})f_2^2\big] \\
&\quad \times \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot(\vec{r}_i-\vec{r}_j)} \\
&= \sum_{i,j}(p_1f_1+p_2f_2)^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot(\vec{r}_i-\vec{r}_j)} + \mathcal{N}p_1p_2(f_1-f_2)^2
\end{aligned}$$

Le premier terme donne lieu à des pics de diffraction, mais le second est un fond continu.

# 20.2 Exercices du chapitre 2

## 2.5.3 Déterminant et trace

**1.** Soit $A(t) = A(0)\exp(Bt)$. Calculons la dérivée

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A(0)\mathrm{e}^{Bt} = A(0)\mathrm{e}^{Bt}B = A(t)B$$

La solution de

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = BA(t)$$

est

$$A(t) = \mathrm{e}^{Bt}A(0)$$

**2.** On remarque que pour $\delta t$ infinitésimal

$$\det \mathrm{e}^{A\delta t} \simeq \det(I + A\delta t) = 1 + \delta t \,\mathrm{Tr}\, A + O(\delta t)^2$$

Par exemple, pour une matrice $2\times 2$

$$\det\begin{pmatrix} 1 + A_{11}\delta t & A_{12}\delta t \\ A_{21}\delta t & 1 + A_{22}\delta t\end{pmatrix} = 1 + (A_{11}+A_{22})\delta t + (A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21})(\delta t)^2$$

Soit $g(t) = \det[\exp(At)]$,

$$\begin{aligned}
g'(t) &= \lim_{\delta t\to 0}\frac{1}{\delta t}\left(\det \mathrm{e}^{A(t+\delta t)} - \det \mathrm{e}^{At}\right) \\
&= \frac{1}{\delta t}\left(\det \mathrm{e}^{A\delta t} - 1\right)\det \mathrm{e}^{At} = \frac{1}{\delta t}\left[\delta t \,\mathrm{Tr}\, A\right]\det \mathrm{e}^{At} = \mathrm{Tr}\, A g(t)
\end{aligned}$$

et on obtient pour $g(t)$ l'équation différentielle

$$g'(t) = [\mathrm{Tr}\, A]g(t) \Longrightarrow g(t) = \mathrm{e}^{t\,\mathrm{Tr}\, A}$$

en utilisant la condition aux limites $g(0) = 1$. En posant $t = 1$,

$$g(1) = \mathrm{e}^{\mathrm{Tr}\, A} = \det\left[\mathrm{e}^{A}\right]$$

## 2.5.10 Matrices positives

**1.** Décomposons $A$ en une partie hermitienne et une partie antihermitienne

$$A = B + C \qquad B = B^\dagger \qquad C = -C^\dagger$$

On note que $(x, Cx)$ est imaginaire pur

$$(x, Cx) = (C^\dagger x, x) = (x, C^\dagger x)^* = -(x, Cx)$$

alors que $(x, Bx)$ est réel. Si l'on veut que $(x, Ax)$ soit réel et $\geq 0$, il est nécessaire que $C = 0$. Donnons une démonstration plus explicite. Soit, par exemple,

$$x = (x_1, x_2, 0, \dots, 0)$$

Alors,

$$(x, Cx) = x_1^* C_{12} x_2 + x_2^* C_{21} x_1 = 2\mathrm{i}\,\mathrm{Im}(x_1^* C_{12} x_2) = 0 \Longrightarrow C_{12} = 0$$

Comme $A$ est hermitienne, elle est diagonalisable. Soit $\varphi$, un vecteur propre de $A$, $A\varphi = a\varphi$. La condition de positivité implique $(\varphi, A\varphi) = a||\varphi||^2 \geq 0$ et donc $a \geq 0$.

**2.** Pour une matrice réelle antisymétrique $C^T = -C$

$$(x, Cx) = x_1 C_{12} x_2 + x_2 C_{21} x_1 = x_1 (C_{12} + C_{21}) x_2 = 0$$

On peut donc avoir une matrice positive de la forme

$$A = B + C \qquad B^T = B \qquad C^T = -C \neq 0$$

## 2.5.11 Identités opératorielles

**1.** Calculons $\mathrm{d}f/\mathrm{d}t$

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \mathrm{e}^{tA} A B \mathrm{e}^{-tA} - \mathrm{e}^{tA} B A \mathrm{e}^{-tA} = \mathrm{e}^{tA} [A, B] \mathrm{e}^{-tA}$$

La dérivée seconde se calcule de la même façon et le cas général s'obtient par récurrence.

**2.** Calculons $\mathrm{d}g/\mathrm{d}t$

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}t} = \mathrm{e}^{tA} (A + B) \mathrm{e}^{tB}$$

et utilisons le résultat de la question précédente

$$\mathrm{e}^{tA} B = \mathrm{e}^{tA} B \mathrm{e}^{-tA} \mathrm{e}^{tA} = (B + t[A, B]) \mathrm{e}^{tA}$$

En effet, compte tenu des relations de commutation de $[A, B]$ avec $A$ et $B$, le développement en série s'arrête au deuxième terme. Nous obtenons donc l'équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}t} = \Big(A + B + t[A, B]\Big)\, g(t)$$

Compte tenu des relations de commutation, cette équation s'intègre en

$$g(t) = \mathrm{e}^{(A+B)t + \frac{1}{2}[A,B]t^2}$$

Notons que l'intégration n'est possible que parce que $[[A, B], A + B] = 0$. Posant $t = 1$,

$$g(1) = \mathrm{e}^{A}\,\mathrm{e}^{B} = \mathrm{e}^{A+B+[A,B]/2} = \mathrm{e}^{A+B}\,\mathrm{e}^{[A,B]/2}$$

# 20.3 Exercices du chapitre 3

## 3.3.1 Polarisation elliptique et détermination de la polarisation

**1.** Nous pouvons choisir $\delta_x = 0$, $\delta_y = \delta$. L'équation de l'ellipse

$$x = \cos\theta\,\cos\omega t \qquad\qquad y = \sin\theta\,\cos(\omega t - \delta)$$

s'écrit en coordonnées cartésiennes

$$\frac{x^2}{\cos^2\theta} - 2xy\,\frac{\cos\delta}{\sin\theta\,\cos\theta} + \frac{y^2}{\sin^2\theta} = \sin^2\delta$$

La direction des axes est obtenue en recherchant les vecteurs propres de la matrice

$$A = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{\cos^2\theta} & -\dfrac{\cos\delta}{\sin\theta\,\cos\theta} \\ -\dfrac{\cos\delta}{\sin\theta\,\cos\theta} & \dfrac{1}{\sin^2\theta} \end{pmatrix}$$

qui font des angles $\alpha$ et $\alpha + \pi/2$ avec l'axe des $x$, où $\alpha$ est donné par

$$\tan\alpha = \cos\delta\tan 2\theta$$

Le produit vectoriel de la position $\vec{r}$ et de la vitesse $\vec{v}$, $\vec{r}\times\vec{v}$, se calcule immédiatement

$$\vec{r}\times\vec{v} = \frac{1}{2}\,\omega\hat{z}\sin 2\theta\sin\delta$$

et le sens de la rotation est donné par le signe du produit $\sin 2\theta\sin\delta$.

**2.** L'intensité à l'entrée du polariseur est

$$I_0 = k\left(E_0^2\cos^2\theta + E_0^2\sin^2\theta\right) = kE_0^2$$

où $k$ est un facteur de proportionnalité. À la sortie du polariseur, cette intensité vaut

$$I = kE_0^2 \cos^2\theta = I_0 \cos^2\theta$$

La mesure de la réduction de l'intensité permet de déterminer $|\cos\theta|$.

**3.** La projection du champ électrique sur l'axe du polariseur est

$$\frac{E_0}{\sqrt{2}} \left[ \cos\theta \, \cos\omega t + \sin\theta \, \cos(\omega t - \delta) \right]$$

et l'intensité est donnée par la moyenne temporelle

$$\begin{aligned} I' &= kE_0^2 \Big\langle \cos^2\theta \, \cos^2\omega t + \sin^2\theta \, \cos^2(\omega t - \delta) + 2\sin\theta\cos\theta \, \cos\omega t \cos(\omega t - \delta) \Big\rangle \\ &= \frac{1}{2}\, kE_0^2(1 + \sin 2\theta \cos\delta) = \frac{1}{2}\, I_0(1 + \sin 2\theta \cos\delta) \end{aligned}$$

De la mesure de $I'$, nous déduisons $\cos\delta$, ce qui permet de déterminer $\delta$ au signe près. Les ambiguïtés restantes sont levées si l'on remarque que l'ellipse est invariante sous les transformations

$$\theta \to \theta + \pi \qquad \delta \to \delta$$

et

$$\theta \to -\theta \qquad \delta \to \delta + \pi$$

### 3.3.2 Une stratégie optimale pour Ève

**1.** Si Alice utilise la base $|x\rangle$, la probabilité pour que Ève devine correctement, est $\mathsf{p}_x = \cos^2\phi$. Si Alice utilise la base $|\pm\pi/4\rangle$, cette probabilité est

$$\mathsf{p}_{\pi/4} = |\langle\phi| \pm \pi/4\rangle|^2 = \frac{1}{2}\,(\cos\phi + \sin\phi)^2$$

La probabilité globale pour que Ève devine correctement est donc

$$\begin{aligned} \mathsf{p}(\phi) &= \frac{1}{2}\,(\mathsf{p}_x + \mathsf{p}_{\pi/4}) = \frac{1}{4}\left[2\cos^2\phi + (\cos\phi + \sin\phi)^2\right] \\ &= \frac{1}{4}\,[2 + \cos 2\phi + \sin 2\phi] \end{aligned}$$

Le maximum de $\mathsf{p}(\phi)$ est atteint pour $\phi = \phi_0 = \pi/8$, ce qui est évident par symétrie : le maximum doit être atteint pour la bissectrice des axes $Ox$ et $\pi/4$. La valeur maximale est

$$\mathsf{p}_{\max} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \simeq 0.854$$

**2.** Si Alice envoie un photon $|\theta\rangle$ ($|\theta_\perp\rangle$), Ève obtient la réponse correcte avec une probabilité $\cos^2\theta$ ($\sin^2\theta$), et la probabilité pour que Bob reçoive la polarisation correcte est $\cos^4\theta$ ($\sin^4\theta$). La probabilité de succès pour Ève est

$$\mathsf{p}_{\rm s} = \frac{1}{2}\left(1+\cos^4\theta+\sin^4\theta\right)$$

et sa probabilité d'erreur

$$\mathsf{p}_{\rm e} = 1-\mathsf{p}_{\rm s} = \sin^2\theta\cos^2\theta = \frac{1}{4}\sin^2 2\theta$$

Les erreurs d'Ève sont maximisées pour $\theta = \pi/4$.

### 3.3.5 Autres solutions de (3.45)

**1.** L'action de $U$ sur $\sigma_x$ et $\sigma_y$ est

$$U^\dagger\,\sigma_x\,U = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi} \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\psi} & 0 \end{pmatrix} \qquad U^\dagger\,\sigma_y\,U = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi} \\ \mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\psi} & 0 \end{pmatrix}$$

$\sigma_z$ est évidemment inchangé.

**2.** Les solutions possibles de (3.45) sont

$$\begin{array}{rclll} \cos(\alpha-\alpha_x) & = & \cos\phi & \qquad \alpha-\alpha_x=\phi \;\text{ ou }\; \alpha-\alpha_x=-\phi \\ \cos(\alpha-\alpha_y) & = & \sin\phi & \qquad \alpha-\alpha_y=\dfrac{\pi}{2}-\phi \;\text{ ou }\; \alpha-\alpha_y=\phi-\dfrac{\pi}{2} \end{array}$$

La différence

$$(\alpha-\alpha_x)-(\alpha-\alpha_y) = -(\alpha_x-\alpha_y)$$

doit être indépendante de $\phi$ car $\alpha_x$ et $\alpha_y$ sont des données indépendantes de $\alpha$. On a donc deux solutions possibles

- Solution 1

  $$\alpha-\alpha_x=\phi \qquad \alpha-\alpha_y=\phi-\frac{\pi}{2}$$

  soit,

  $$\alpha_x = \alpha_y-\frac{\pi}{2}$$

  et

  $$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_x} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_x} & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_x} \\ \mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_x} & 0 \end{pmatrix}$$

  D'après la question **1**, cette nouvelle forme correspond à une rotation des axes d'un angle $\alpha_x$ autour de $Oz$.

- Solution 2

  $$\alpha-\alpha_x=-\phi \qquad \alpha-\alpha_y=\frac{\pi}{2}-\phi$$

Choisissant pour la solution de base $\alpha_x = 0$ et $\alpha_y = -\pi/2$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$$

Le changement de signe de $\sigma_y$ correspond à une inversion de l'axe $Oy$ : on passe d'un trièdre droit à un trièdre gauche. Les autres solutions s'obtiennent à partir de la solution de base par une rotation autour de $Oz$.

### 3.3.7 Exponentielles de matrices de Pauli

**1.** Compte tenu de (3.50),

$$(\vec{\sigma}\cdot\hat{n})^2 = I \qquad (\vec{\sigma}\cdot\hat{n})^3 = (\vec{\sigma}\cdot\hat{n})\ldots$$

le développement de l'exponentielle est

$$\begin{aligned}\exp\left(-\mathrm{i}\,\frac{\theta}{2}\,\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\right) &= I - \mathrm{i}\,\frac{\theta}{2}\vec{\sigma}\cdot\hat{n} + \frac{1}{2!}\left(-\mathrm{i}\,\frac{\theta}{2}\right)^2 I + \frac{1}{3!}\left(-\mathrm{i}\,\frac{\theta}{2}\right)^3 \vec{\sigma}\cdot\hat{n}\cdots \\ &= I\cos\frac{\theta}{2} - \mathrm{i}(\vec{\sigma}\cdot\hat{n})\sin\frac{\theta}{2}\end{aligned}$$

**2.** On doit avoir

$$\begin{aligned} U &= a_1 I + \mathrm{i}a_2\sigma_z + \mathrm{i}b_2\sigma_x + \mathrm{i}b_1\sigma_y \\ &= I\cos\frac{\theta}{2} - \mathrm{i}\sin\frac{\theta}{2}\begin{pmatrix} n_z & n_x - \mathrm{i}n_y \\ n_x + \mathrm{i}n_y & -n_z\end{pmatrix}\end{aligned}$$

et on en déduit

$$a_1 = \cos\frac{\theta}{2} \qquad a_2 = -n_z\sin\frac{\theta}{2} \qquad b_2 = -n_x\sin\frac{\theta}{2} \qquad b_1 = -n_y\sin\frac{\theta}{2}$$

ce qui est possible car

$$a_1^2 + a_2^2 + b_1^2 + b_2^2 = 1$$

**3.** Le produit de deux exponentielles de matrices de Pauli vaut

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(\vec{\sigma}\cdot\hat{a})}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta(\vec{\sigma}\cdot\hat{b})} &= \cos\alpha\cos\beta - \mathrm{i}\sin\alpha\cos\beta(\vec{\sigma}\cdot\hat{a}) - \mathrm{i}\sin\beta\cos\alpha(\vec{\sigma}\cdot\hat{b}) \\ &\quad - \sin\alpha\sin\beta[\hat{a}\cdot\hat{b} + \mathrm{i}\vec{\sigma}\cdot(\hat{a}\times\hat{b})]\end{aligned}$$

Par ailleurs,

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[\alpha(\vec{\sigma}\cdot\hat{a})+\beta(\vec{\sigma}\cdot\hat{b})]} = I\cos||\alpha\hat{a}+\beta\hat{b}|| - \mathrm{i}\,\frac{\sin||\alpha\hat{a}+\beta\hat{b}||}{||\alpha\hat{a}+\beta\hat{b}||}[\alpha(\vec{\sigma}\cdot\hat{a}) + \beta(\vec{\sigma}\cdot\hat{b})]$$

Pour avoir l'égalité des deux facteurs, il faut

- se débarrasser des sinus
- avoir $\cos\alpha\cos\beta = \cos\sqrt{\alpha^2+\beta^2}$

On peut par exemple choisir

$$\alpha = 3\pi \qquad \beta = 4\pi \qquad \sqrt{\alpha^2+\beta^2} = 5\pi$$

avec

$$e^{-3i\pi\sigma_x} = -I \qquad e^{-4i\pi\sigma_y} = I \qquad e^{-i(3\pi\sigma_x + 4\pi\sigma_y)} = -I$$

### 3.3.12 Diffusion de neutrons par un cristal : noyaux de spin 1/2

**1.** Lorsqu'il n'y a pas de changement de l'état de spin, il n'est pas possible de savoir quel noyau a diffusé le neutron, et il faut donc ajouter les amplitudes

$$f = f_a \sum_i e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \qquad \mathcal{I} = f_a^2 \sum_{i,j} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}$$

**2.** Si la diffusion se fait avec renversement du spin, la diffusion laisse le noyau dans un état de spin différent de l'état de spin initial. Si tous les noyaux avaient initialement spin down, le noyau qui a diffusé le neutron a spin up après la diffusion et il est en principe identifiable (même si cette identification est impossible en pratique). La diffusion d'un neutron par un noyau plutôt qu'un autre correspond donc à des états finaux différents, et il faut ajouter les probabilités

$$\mathcal{I} = \sum_i f_b^2 = \mathcal{N} f_b^2$$

**3.** Soit $\{\alpha_i\}$, la configuration des spins dans le cristal. Si un neutron est diffusé par le cristal dans la configuration $\{\alpha_i\}$, l'amplitude de diffusion est

$$f = \sum_i (\alpha_i f_a + (1-\alpha_i) f_c)\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} + \sum_i \alpha_i f_b e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}$$

Si la configuration $\{\alpha_i\}$ était fixée, l'intensité serait

$$\mathcal{I}_{\alpha_i} = \sum_{i,j} (\alpha_i f_a + (1-\alpha_i) f_c)^2\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + \sum_i \alpha_i^2 f_b^2$$

En remarquant que $\alpha_i = \alpha_i^2$, les valeurs moyennes sont $\langle \alpha_i \rangle = \langle \alpha_i^2 \rangle = 1/2$ et $\langle \alpha_i \alpha_j \rangle = 1/4$ si $i \neq j$, d'où

$$\begin{aligned} \mathcal{I} \;=\; & \sum_{i,j} \left\langle \left( \alpha_i\alpha_j f_a^2 + 2\alpha_i(1-\alpha_j) f_a f_c + (1-\alpha_i)(1-\alpha_j) f_c^2 \right) \right\rangle e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \\ & + \sum_i \langle \alpha_i \rangle f_b^2 \end{aligned}$$

d'où le résultat de l'énoncé

$$\mathcal{I} = \frac{1}{4}\,(f_a + f_c)^2 \sum_{i,j} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + \frac{\mathcal{N}}{4}\,[(f_a - f_c)^2 + 2f_b^2]$$

**4.** Par invariance par rotation, on a, par exemple,

$$f_a \;:\; \text{neutron} \downarrow + \text{noyau} \uparrow \;\to\; \text{neutron} \downarrow + \text{noyau} \uparrow$$

et un résultat analogue pour les deux autres amplitudes. On retrouve le résultat de la question précédente si les neutrons sont polarisés avec un spin down. Le résultat avec des neutrons non polarisés s'obtient en prenant la moyenne du résultat spin en haut et spin en bas, et on retrouve à nouveau le résultat de la question **3**.

## 20.4 Exercices du chapitre 4

### 4.4.4 Évolution temporelle d'un système à deux niveaux

**1.** Le système d'équations différentielles vérifié par $c_\pm(t)$ est

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\dot{c}_+ &= Ac_+ + Bc_- \\ \mathrm{i}\dot{c}_- &= Bc_+ - Ac_- \end{aligned}$$

**2.** Si $|\varphi(t=0)\rangle$ se décompose sur les vecteurs propres $|\chi_\pm\rangle$ suivant

$$|\varphi(t=0)\rangle = \lambda|\chi_+\rangle + \mu|\chi_-\rangle$$

alors

$$|\varphi(t)\rangle = \lambda \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t/2}|\chi_+\rangle + \mu \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega t/2}|\chi_-\rangle$$

Compte tenu de $\langle +|\chi_+\rangle = \cos\theta/2$ et $\langle +|\chi_-\rangle = -\sin\theta/2$, on trouve pour $c_+(t)$

$$c_+(t) = \langle +|\varphi(t)\rangle = \lambda \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t/2}\cos\frac{\theta}{2} - \mu \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega t/2}\sin\frac{\theta}{2}$$

**3.** Si $c_+(0) = 0$

$$\lambda\cos\frac{\theta}{2} - \mu\sin\frac{\theta}{2} = 0$$

et une solution possible est

$$\lambda = \sin\frac{\theta}{2} \qquad \mu = \cos\frac{\theta}{2}$$

ce qui donne pour $c_+(t)$

$$c_+(t) = -\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t/2} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega t/2}\right) = \mathrm{i}\sin\theta\sin\frac{\Omega t}{2}$$

La probabilité $\mathsf{p}_+(t)$ est

$$\mathsf{p}_+(t) = |c_+(t)|^2 = \sin^2\theta \sin^2\frac{\Omega t}{2} = \frac{B^2}{A^2+B^2}\sin^2\frac{\Omega t}{2}$$

**4.** Si $c_+(0) = 1$, une solution possible est

$$\lambda = \cos\frac{\theta}{2} \qquad \mu = -\sin\frac{\theta}{2}$$

et on obtient pour $c_+(t)$

$$\begin{aligned} c_+(t) &= \cos^2\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t/2} + \sin^2\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega t/2} \\ &= \cos\frac{\Omega t}{2} - \mathrm{i}\cos\theta\sin\frac{\Omega t}{2} \end{aligned}$$

La probabilité $\mathsf{p}_+(t)$ vaut

$$\mathsf{p}_+(t) = |c_+(t)|^2 = \cos^2\frac{\Omega t}{2} + \cos^2\theta\sin^2\frac{\Omega t}{2} = 1 - \sin^2\theta\cos^2\frac{\Omega t}{2}$$

### 4.4.5 Inégalités de Heisenberg temporelles

**1.** En utilisant (2.70) et $[H, T] = \mathrm{i}\hbar I$, on obtient

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha T}\,H\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha T} = H + \mathrm{i}\alpha$$

soit

$$H\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha T}H|\Psi\rangle\right) = (E + \alpha\hbar)\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha T}H|\Psi\rangle\right)$$

L'état $\exp(\mathrm{i}\alpha T)|\Psi\rangle$ est un état d'énergie $(E + \alpha\hbar)$ ; $\exp(\mathrm{i}\alpha T)$ effectue une translation d'énergie de même que $\exp(\mathrm{i}aP/\hbar)$ effectue une translation de $a$ (voir(8.4)). Comme $\alpha$ est arbitraire, des états d'énergie arbitrairement grande et négative seraient possibles.

**2.** Utilisons le développement en série de $\langle\exp(-\mathrm{i}Ht/\hbar)\rangle$ pour des petites valeurs de $t$

$$c(t) = 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle H\rangle t - \frac{1}{2\hbar^2}\langle H^2\rangle t^2 + O(t^3)$$

de sorte que

$$\begin{aligned} |c(t)|^2 &= 1 - \frac{\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2}{\hbar^2}t^2 + O(t^3) \\ &= 1 - \frac{(\Delta H)^2}{\hbar^2}t^2 + O(t^3) \end{aligned}$$

où $\langle\bullet\rangle$ est une moyenne calculée avec $|\varphi\rangle$ : $\langle\bullet\rangle = \langle\varphi|\bullet|\varphi\rangle$

**3.** Nous déduisons de (4.27), avec la substitution $A \to \mathcal{P}$

$$\Delta\mathcal{P}\Delta H \leq \frac{1}{2}\,\hbar\Big|\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t}\Big| \qquad \mathsf{p}(t) = \langle\mathcal{P}\rangle(t)$$

tandis que

$$\Delta\mathcal{P} = (\langle\mathcal{P}^2\rangle - \langle\mathcal{P}\rangle^2)^{1/2} = (\langle\mathcal{P}\rangle - \langle\mathcal{P}\rangle^2)^{1/2} = \sqrt{\mathsf{p}(1-\mathsf{p})}$$

Nous obtenons ainsi l'inégalité différentielle

$$\frac{\mathrm{d}\mathsf{p}}{\sqrt{\mathsf{p}(1-\mathsf{p})}} \geq 2\,\frac{\Delta H}{\hbar}\,\mathrm{d}t$$

qu s'intègre en

$$\cos^{-1}[1-2\mathsf{p}(t)] \geq 2\,\frac{\Delta H}{\hbar}\,t$$

et, par conséquent,

$$\mathsf{p}(t) \geq \cos^2\left(\frac{t\Delta H}{\hbar}\right) \qquad 0 \leq t \leq \frac{\pi\hbar}{2\Delta H}$$

### 4.4.6 L'énigme des neutrinos solaires

**1.** Dans le référentiel au repos, le hamiltonien s'écrit

$$\frac{1}{c^2}\,H = \frac{m_e + m_\mu}{2}\,I + \begin{pmatrix} \frac{m_e - m_\mu}{2} & m \\ m & -\frac{m_e - m_\mu}{2} \end{pmatrix}$$

La comparaison avec l'exercice 4.4.4 conduit à la correspondance

$$A \to \frac{m_e - m_\mu}{2} \qquad B \to m \qquad \tan\theta = \frac{B}{A} \to \frac{2m}{m_e - m_\mu}$$

**2.** Les états $|\nu_1\rangle$ et $|\nu_2\rangle$ étant vecteurs propres de $H$, l'évolution de $|\varphi(t)\rangle$ est

$$|\varphi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t/\hbar}|\nu_1\rangle - \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}|\nu_2\rangle$$

Compte tenu de

$$\langle\nu_e|\nu_1\rangle = \cos\frac{\theta}{2} \qquad \langle\nu_e|\nu_2\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}$$

on trouve pour l'amplitude $c_e(t)$

$$c_e(t) = \langle\nu_e|\varphi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t/\hbar}\left(\cos^2\frac{\theta}{2} + \sin^2\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_2-E_1)t/\hbar}\right)$$

et pour la probabilité $|c_e(t)|^2$

$$\begin{aligned}|c_e(t)|^2 &= \cos^4\frac{\theta}{2}+\sin^4\frac{\theta}{2}+2\cos^2\frac{\theta}{2}\sin^2\frac{\theta}{2}\cos\frac{\Delta Et}{\hbar}\\ &= 1-\frac{1}{2}\sin^2\theta\left(1-\cos\frac{\Delta Et}{\hbar}\right)=1-\sin^2\theta\sin^2\frac{\Delta Et}{2\hbar}\end{aligned}$$

**3.** Lorsque $p \gg mc$, on obtient une expression approchée de $E$

$$E=(m^2c^4+p^2c^2)^{1/2}=cp\left(1+\frac{m^2c^2}{p^2}\right)^{1/2}\simeq cp+\frac{m^2c^3}{2p}$$

et

$$\Delta E=E_2-E_1=\frac{(m_2^2-m_1^2)c^3}{2p}=\frac{\Delta m^2c^3}{2p}$$

En remplaçant $ct$ par la distance parcourue $L$, l'oscillation est en

$$\sin^2\left(\frac{\Delta m^2c^2L}{2p\hbar}\right)$$

Si l'on observe une demi-oscillation sur la distance Soleil-Terre

$$\frac{\Delta m^2c^2L}{2p\hbar}=\pi \qquad \Delta m^2c^4=\frac{2\pi\hbar c}{L}\,cp\simeq 7\times 10^{-11}\,\mathrm{eV}^2$$

et donc $\Delta mc^2 \sim 10^{-5}$ eV.

## 4.4.8 Borne de Helstrom

**1.** Les valeurs moyennes de $\mathcal{P}$ sont

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\mathcal{P}|\varphi\rangle &= |\langle\varphi|\psi\rangle|^2=\cos^2\frac{\alpha}{2}=\frac{1}{2}(1+\cos\alpha)\\ \langle\chi|\mathcal{P}|\chi\rangle &= |\langle\chi|\psi\rangle|^2=\cos^2\frac{(\alpha-\theta)}{2}=\frac{1}{2}(1+\cos(\alpha-\theta))\end{aligned}$$

d'où l'expression de $X$

$$2X-1=(r-s\cos\theta)\cos\alpha-s\sin\theta\sin\alpha=a\cos\alpha-b\sin\alpha$$

On note que $a=r-s\cos\theta\geq 0$. La condition de maximisation $\mathrm{d}X/\mathrm{d}\alpha=0$ donne

$$a\sin\alpha+b\cos\alpha=0$$

soit

$$\sin\alpha=\pm\frac{b}{\sqrt{a^2+b^2}} \qquad \cos\alpha=\mp\frac{a}{\sqrt{a^2+b^2}}$$

avec

$$a^2 + b^2 = D = 1 - 4rs\cos^2\frac{\theta}{2}$$

On en déduit $X$

$$2X - 1 = \sqrt{a^2 + b^2} = \sqrt{D}$$

d'où la borne de Helstrom

$$\mathsf{p}_{\max} = \frac{1}{2}\left(1 + \sqrt{D}\right) = \frac{1}{2}\left(1 + \sqrt{1 - 4rs|\langle\varphi|\chi\rangle|^2}\right)$$

**2.** Si l'on tient compte des angles $\phi$ et $\beta$, l'expression de $2X - 1$ devient en fonction de $\gamma = \phi - \beta$

$$2X - 1 = (r - s\cos\theta)\cos\alpha - s\sin\theta\cos\gamma\sin\alpha$$

et l'équation $\mathrm{d}X/\mathrm{d}\alpha = 0$

$$(r - s\cos\theta)\sin\alpha + s\sin\theta\cos\gamma\cos\alpha = 0$$

ce qui donne

$$a = r - s\cos\theta \qquad b = s\sin\theta\cos\gamma \qquad a^2 + b^2 = D - s^2\sin^2\theta\sin^2\gamma$$

et

$$2X - 1 = \frac{1}{2}\left(1 + \left[1 - 4rs\cos^2\frac{\theta}{2} - s^2\sin^2\theta\sin^2\gamma\right]^{1/2}\right)$$

qui est maximum pour $\gamma = 0$. Pour cette valeur de $\gamma$, on retrouve la borne de Helstrom. Si maintenant $|\psi\rangle$ possède une composante $|\psi_\perp\rangle$ dans l'espace $\mathcal{H}_\perp$ orthogonal au sous-espace $\mathcal{H}_\parallel$ sous-tendu par $|\varphi\rangle$ et $\chi\rangle$, nous pouvons écrire

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}}\left(\cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle + \sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle + |\psi_\perp\rangle\right)$$

où $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont deux vecteurs de base de $\mathcal{H}_\parallel$ et $|\psi_\perp\rangle \in \mathcal{H}_\perp$. La constante de normalisation $\mathcal{N}$ est

$$\mathcal{N}^2 = 1 + \|\psi_\perp\|^2$$

Il est immédiat de répéter la minimisation et de constater que le résultat optimal est obtenu pour $\mathcal{N} = 1$, soit $|\psi_\perp\rangle = 0$.

### 4.4.9 Règle de Born généralisée

La probabilité de trouver la valeur 1 pour $\mathcal{P}_{i_0j_0}$ est égale à sa valeur moyenne dans l'état $|\Psi\rangle$

$$\langle\Psi|\mathcal{P}_{i_0j_0}|\Psi\rangle = |c_{i_0j_0}|^2$$

Après mesure de la particule $B$ donnant le résultat $j_0$, le vecteur d'état est donné par application du postulat RPO

$$|\Psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathsf{p}(j_0)}} \sum_i c_{ij_0} |\varphi_i \otimes \chi_{j_0}\rangle = \left( \frac{1}{\sqrt{\mathsf{p}(j_0)}} \sum_i c_{ij_0} |\varphi_i\rangle \right) \otimes |\chi_{j_0}\rangle$$

et le vecteur d'état de $A$ est donc

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathsf{p}(j_0)}} \sum_i c_{ij_0} |\varphi_i\rangle \qquad \mathsf{p}(j_0) = \sum_i |c_{ij_0}|^2$$

La probabilité conditionnelle $\mathsf{p}(i_0|j_0)$ de trouver $i = i_0$ sachant que l'on a mesuré $j = j_0$ est

$$\mathsf{p}(i_0|j_0) = \frac{|c_{i_0 j_0}|^2}{\mathsf{p}(j_0)} = \frac{\mathsf{p}(i_0, j_0)}{\mathsf{p}(j_0)}$$

ce qui est bien la loi de Bayes donnant la probabilité conditionnelle $\mathsf{p}(i_0|j_0)$ en fonction de la probabilité jointe $\mathsf{p}(i_0, j_0)$.

### 4.4.10 Le système des mésons K neutres : évolution non unitaire

**1.** Calculons le produit $\mathcal{C}^{-1} M \mathcal{C}$ pour une matrice $M$ quelconque

$$\mathcal{C} = \mathcal{C}^{-1} = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_x \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \sigma_x = \begin{pmatrix} d & c \\ b & a \end{pmatrix}$$

et la condition de commutation implique $a = d$ et $b = c$.

**2.** Les valeurs propres et vecteurs propres de $M$ sont

$$\begin{aligned} \lambda_+ &= A + B \qquad & |K_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |K^0\rangle + |\overline{K}^0\rangle \right) \\ \lambda_- &= A - B \qquad & |K_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |K^0\rangle - |\overline{K^0}\rangle \right) \end{aligned}$$

L'évolution des états $|K_1\rangle$ et $|K_2\rangle$ est donnée par

$$\begin{aligned} |K_1(t)\rangle &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(A+B)t} |K_1\rangle = \exp\left( -\mathrm{i}\frac{E_1 t}{\hbar} - \frac{\Gamma_1 t}{2} \right) |K_1\rangle \\ |K_2(t)\rangle &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(A-B)t} |K_2\rangle = \exp\left( -\mathrm{i}\frac{E_2 t}{\hbar} - \frac{\Gamma_2 t}{2} \right) |K_2\rangle \end{aligned}$$

Partons de

$$|\varphi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( c(0) + \overline{c}(0) \right) |K_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left( c(0) - \overline{c}(0) \right) |K_2\rangle$$

On obtient au temps $t$

$$\begin{aligned}|\varphi(t)\rangle &= \frac{1}{2}\left(c(0)+\overline{c}(0)\right)\Big(|K^0\rangle+|\overline{K^0}\rangle\Big)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_1/\hbar-\mathrm{i}\Gamma_1/2)t}\\ &\quad+\frac{1}{2}\left(c(0)-\overline{c}(0)\right)\Big(|K^0\rangle-|\overline{K^0}\rangle\Big)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_2/\hbar-\mathrm{i}\Gamma_2/2)t}\end{aligned}$$

ce qui donne pour les coefficients $c(t)$ et $\overline{c}(t)$

$$\begin{aligned}c(t) &= \langle K^0|\varphi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left(c(0)+\overline{c}(0)\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_1/\hbar-\mathrm{i}\Gamma_1/2)t}\\ &\quad+\frac{1}{2}\left(c(0)-\overline{c}(0)\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_2/\hbar-\mathrm{i}\Gamma_2/2)t}\\ \overline{c}(t) &= \langle\overline{K^0}|\varphi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left(c(0)+\overline{c}(0)\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_1/\hbar-\mathrm{i}\Gamma_1/2)t}\\ &\quad-\frac{1}{2}\left(c(0)-\overline{c}(0)\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_2/\hbar-\mathrm{i}\Gamma_2/2)t}\end{aligned}$$

**3.** Dans le cas de figure considéré dans l'énoncé $c(0)=1, \overline{c}(0)=0$ et

$$\overline{c}(t)=\frac{1}{2}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_1/\hbar-\mathrm{i}\Gamma_1/2)t}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_2/\hbar-\Gamma_2/2)t}\right]$$

La probabilité d'observer un méson $\overline{K^0}$ au temps $t$ est

$$\overline{\mathsf{p}}(t)=|\overline{c}(t)|^2=\frac{1}{4}\left[\mathrm{e}^{-\Gamma_1 t}+\mathrm{e}^{-\Gamma_2 t}-2\mathrm{e}^{-(\Gamma_1+\Gamma_2)t/2}\cos\frac{\Delta E t}{\hbar}\right]$$

avec $\Delta E = E_1 - E_2$. On obtient le résultat de l'énoncé si $\Gamma_1 \gg \Gamma_2$.

# 20.5 Exercices du chapitre 5

## 5.5.3 Le butadiène

**1.** Forme matricielle de $H$

$$H=\begin{pmatrix} E_0 & -A & 0 & 0\\ -A & E_0 & -A & 0\\ 0 & -A & E_0 & -A\\ 0 & 0 & -A & E_0\end{pmatrix}$$

**2.** Écrivons l'action de $H$ sur le vecteur $|\chi\rangle$

$$\begin{aligned}H|\chi\rangle &= E_0|\chi\rangle - A\Big(c_1|\varphi_2\rangle+\cdots+c_{N-1}\varphi_N\rangle\Big)+c_0|\varphi_0\rangle\\ &\quad -A\Big(c_2|\varphi_1\rangle+\cdots c_N|\varphi_{N-1}\rangle\Big)+c_{N+1}|\varphi_N\rangle\\ &= E_0|\chi\rangle - A\sum_{n=1}^{N}\Big(c_{n-1}+c_{n+1}\Big)|\varphi_n\rangle\end{aligned}$$

**3.** Compte tenu de la forme de postulée pour les coefficients $c_n$

$$
\begin{aligned}
c_{n-1} + c_{n+1} &= \frac{c}{2\mathrm{i}}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n-1)\delta} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n+1)\delta} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n-1)\delta} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n+1)\delta}\right] \\
&= \frac{c}{2\mathrm{i}}\, 2\cos\delta \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\delta} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\delta}\right] = 2c_n \cos\delta
\end{aligned}
$$

La condition $c_0 = 0$ est vérifiée par construction. La condition $c_{N+1} = 0$ entraîne

$$
\delta_s = \frac{\pi s}{N+1} \qquad s = 0, 1, \cdots, N
$$

**4.** D'après les résultats de la question **1**,

$$
H|\chi_s\rangle = E_0|\chi_s\rangle - 2A\cos\frac{\pi s}{N+1}|\chi\rangle
$$

d'où les valeurs de l'énergie

$$
E_s = E_0 - 2A\cos\frac{\pi s}{N+1}
$$

Calculons la normalisation de $|\chi_s\rangle$

$$
X = \sum_{n=1}^{N} \sin^2\frac{\pi s n}{N+1} = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(1 - \cos\frac{2\pi s n}{N+1}\right)
$$

Mais

$$
\sum_{n=1}^{N} \cos\frac{2\pi s n}{N+1} = \mathrm{Re}\sum_{n=1}^{N}\exp\left(\frac{2\mathrm{i}\pi s n}{N+1}\right) = \mathrm{Re}\frac{1 - \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\pi s}}{1 - \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\pi s/(N+1}} - 1 = -1
$$

et $X = (N+1)/2$. Le vecteur $|\chi_s\rangle$ normalisé est donc

$$
|\chi_s\rangle = \sqrt{\frac{2}{N+1}}\,\sum_{n=1}^{N}\sin(n\delta_s)|\varphi_n\rangle
$$

**5.** Dans le cas du butadiène $N = 4$

$$
\cos\frac{\pi}{5} = 0.809 \qquad \cos\frac{2\pi}{5} = 0.309
$$

ce qui donne pour les deux premiers niveaux d'énergie

$$
E_{s=1} = E_0 - 1.62A \qquad E_{s=2} = E_0 - 0.62A
$$

L'énergie des quatre électrons $\pi$ est donc

$$
E = 4E_0 - 2(1.62A + 0.62A) = 4(E_0 - A) - 0.48A
$$

L'énergie de délocalisation est de $-0.48A$.

**7.** Les coefficients du vecteur propre $|\chi_1\rangle$ normalisé sont

$$(0.372, 0.601, 0.601, 0.372)$$

tandis que ceux de $|\chi_2\rangle$ sont

$$(0.601, 0.372, -0.372, -0.601)$$

L'ordre de la liaison 1-2 est

$$1 + 2\Big[\langle\varphi_1|\chi_1\rangle\langle\chi_1|\varphi_2\rangle + \langle\varphi_1|\chi_2\rangle\langle\chi_2|\varphi_2\rangle\Big] = 1.89$$

très proche d'une double liaison, tandis que pour la liaison 2-3

$$1 + 2\Big[\langle\varphi_2|\chi_1\rangle\langle\chi_1|\varphi_3\rangle + \langle\varphi_2|\chi_2\rangle\langle\chi_2|\varphi_3\rangle\Big] = 1.45$$

Cette liaison est moins forte que la précédente, ce qui explique qu'elle soit plus proche d'une liaison simple et donc plus longue.

### 5.5.5 L'ion moléculaire $\mathbf{H}_2^+$

**1.** Le potentiel $V(x)$ vaut

$$V(x) = -e^2\left(\frac{1}{|x+r/2|} + \frac{1}{|x-r/2|}\right)$$

Il est égal à $-\infty$ si $x = \pm r/2$ et passe par un maximum de $-4e^2/r$ pour $x = 0$.

**2.** $l \simeq a_0$, dimension caractéristique de l'atome d'hydrogène.

**3.** Valeurs propres et vecteurs propres

$$\begin{aligned} E_+ &= E_0 - A \qquad & |\chi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle\Big) \\ E_- &= E_0 + A \qquad & |\chi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\varphi_1\rangle - |\varphi_2\rangle\Big) \end{aligned}$$

**4.** $A$ est un coefficient de transmission par effet tunnel. La barrière de potentiel voit sa largeur diminuer quand $r$ décroît : le coefficient de transmission augmente quand $r$ diminue.

**5.** $e^2/r$ est l'énergie potentielle (répulsive) entre les deux protons

$$E'_\pm(r) = E_\pm(r) + \frac{e^2}{r} = E_0 \mp A(r) + \frac{e^2}{r}$$

**6.** L'expression approchée de $E'_+(r)$ est

$$E'_+(r) = E_0 + e^2\left(\frac{1}{r} - c\,\mathrm{e}^{-b/r}\right) = E_0 + \Delta E(r)$$

Cherchons le minimum de $\Delta E(r)$

$$\frac{\mathrm{d}\Delta E(r)}{\mathrm{d}r} = e^2\left(-\frac{1}{r^2} + \frac{c}{b}\mathrm{e}^{-r/b}\right) \Longrightarrow \frac{1}{r_0^2} = \frac{c}{b}\,\mathrm{e}^{-r_0/b}$$

et l'on obtient

$$\Delta E(r_0) = e^2\left(\frac{1}{r_0} - c\,\mathrm{e}^{-r_0/b}\right) = e^2\left(\frac{1}{r_0} - \frac{b}{r_0^2}\right)$$

On en déduit

$$b = \frac{6}{5}r_0 = \frac{12}{5}a_0 \qquad\qquad c = \frac{3}{5a_0}\,\mathrm{e}^{5/6} \simeq \frac{1.38}{a_0}$$

Il faut que $b > r_0$ pour que l'ion $H_2^+$ soit un état lié.

### 5.5.6 Compléments sur la RMN

**2.** Récrivons $H_1$ en termes de $\sigma_+$ et $\sigma_-$

$$\sigma_x = \sigma_+ + \sigma_-$$

$$H_1 = -\frac{\hbar}{2}\,\omega_1(\sigma_+ + \sigma_-)\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right)$$

d'où

$$\hat{H}_1(t) = -\frac{\hbar}{2}\,\omega_1\sigma_+\left(1 + \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}\right) - \frac{\hbar}{2}\,\omega_1\sigma_-\left(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega t} + 1\right)$$

Dans le cadre de l'approximation séculaire où l'on néglige les termes rapidement oscillants $\exp(\pm 2\mathrm{i}\omega t)$

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar}{2}\,\omega_1\left(\sigma_+ + \sigma_-\right) = -\frac{\hbar}{2}\,\omega_1\sigma_x$$

La composante $B_1(\hat{x}\cos\omega t - \hat{y}\sin\omega t)$ du champ de radiofréquences est fixe dans le référentiel tournant : à la résonance, elle suit la précession de Larmor, alors que la composante $B_1(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t)$ tourne en sens inverse. Elle oscille rapidement dans le référentiel tournant et son influence est négligable.

## 20.6 Exercices du chapitre 6

### 6.4.3 Relations de commutation canoniques

**1.** Supposant $B$ borné, on peut définir $B' = B/||B||$, $||B'|| = 1$, et $A' = A||B||$ sans modifier les relations de commutation : $[A', B'] = \mathrm{i}I$. On supposera donc $||B|| = 1$. Utilisons un raisonnement par récurrence en supposant

$$[B, A^n] = \mathrm{i}nA^{n-1}$$

On a alors

$$[B, A^{n+1}] = [B, AA^n] = A[B, A^n] + [B, A]A^n = \mathrm{i}(n+1)A^n$$

ce qui prouve l'hypothèse de départ. Supposons $A$ borné et soit $||A||$ sa norme. On obtient, en utilisant l'inégalité valable pour deux opérateurs $C$ et $D$

$$||C||\,||D|| \geq ||CD||$$

la relation

$$2||A^n||\,||B|| \geq ||BA^n - A^nB|| = n||A^{n-1}||$$

d'où

$$||A^n|| \geq \frac{n}{2}\,||A^{n-1}||$$

On en déduit l'encadrement suivant pour $||A^n||$

$$\frac{n}{2}\,||A^{n-1}|| \leq ||A^n|| \leq ||A||\,||A^{n-1}|| \quad \text{car} \quad ||A^n|| \leq ||A||\,||A^{n-1}||$$

et donc $||A|| \geq n/2$. Il est impossible que $A$ soit borné.

**2.** Le problème est que si $A$ est non borné, le vecteur $B|\varphi\rangle$ n'appartient pas au domaine de $A$ et $AB|\varphi\rangle$ n'est pas défini : on ne peut pas prendre la conjugaison hermitienne et écrire

$$\langle\varphi|AB|\varphi\rangle = \langle A\varphi|B\varphi\rangle$$

Par exemple si l'espace de Hilbert est $L^{(2)}[0,1]$ et $B = X$, qui est borné sur cet espace, tandis que $A = A_C$ défini au § 6.2.2, $(X\varphi)(x) = x\varphi(x) = \psi(x)$ n'appartient pas au domaine de $A_C$ qui est tel que $\varphi(1) = C\varphi(0)$, $|C| = 1$ : les conditions aux limites de $\psi$ sont

$$\psi(1) = \varphi(1) = C\varphi(0) \quad \text{alors que} \quad \psi(0) = 0$$

et $\psi(1) \neq C\psi(0)$. La difficulté se voit immédiatement en représentation $x$

$$\int_0^1 \mathrm{d}x\, \varphi^*(x) \left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x}\, x\varphi(x)\right) \neq \int_0^1 \left(\mathrm{i}\frac{\partial\varphi(x)}{\partial x}\right)^* x\varphi(x)$$

la différence étant $|\varphi(1)|^2$.

**3.** La fonction

$$\varphi(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(2\pi n+\alpha)x} \qquad\qquad C = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$$

vérifie

$$A_C\varphi(x) = (2\pi n + \alpha)\varphi(x) \qquad\qquad \varphi(1) = C\varphi(0)$$

C'est donc un vecteur propre normalisable de valeur propre $(2\pi n + \alpha)$ de $A_C$, qui appartient au domaine de $A_C$. Le théorème de von Neumann ne s'applique pas car $AB|\varphi\rangle$ n'est défini pour aucun vecteur $|\varphi\rangle$ de $\mathcal{H}$, alors que le domaine où $AB$ est défini devrait être dense dans $\mathcal{H}$.

# 20.7 Exercices du chapitre 7

## 7.5.2 Rotations et $SU(2)$

**1.** Partons de la forme générale d'une matrice $2 \times 2$

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

et calculons $U^\dagger U$ qui doit être égal à $I$

$$U^\dagger U = \begin{pmatrix} |a|^2 + |b|^2 & ac^* + bd^* \\ ca^* + db^* & |c|^2 + |d|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ce qui donne

$$|a|^2 + |b|^2 = |c|^2 + |d|^2 = 1$$

De $c = -b^* d/a^*$ et de $\det U = ad - bc = 1$, on tire $d = a^*$.

**2.** À l'ordre $\tau$,

$$U^\dagger U = (I + \mathrm{i}\tau^\dagger)(I - \mathrm{i}\tau) \simeq I - \mathrm{i}(\tau - \tau^\dagger)$$

et la condition $U^\dagger U = I$ implique $\tau = \tau^\dagger$. De plus, la condition $\det U = 1$ entraîne $\mathrm{Tr}\,\tau = 0$. La décomposition (3.54) jointe à la condition $\mathrm{Tr}\,\tau = 0$ permet d'écrire

$$\tau = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} \theta_i \sigma_i$$

les angles $\theta_i$ étant infinitésimaux puisque $\tau$ est infinitésimal.

**3.** Comme $\theta/N$ est infinitésimal on peut écrire

$$U_{\hat{n}}\left(\frac{\theta}{N}\right) = I - \frac{\mathrm{i}\theta}{2N}\,(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})$$

et utilisant

$$\lim_{N \to \infty} \left(1 - \frac{x}{N}\right)^N = \mathrm{e}^{-x}$$

on déduit

$$U_{\hat{n}}(\theta) = \exp\left[-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\,(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})\right]$$

**4.** Le déterminant de $\mathcal{V}$ est égal au signe près à la (longueur)$^2$ du vecteur $\vec{V}$ : $\det \mathcal{V} = -\vec{V}^2$ et comme

$$\det(U \mathcal{V} U^{-1}) = \det \mathcal{V}$$

on obtient $\vec{W}^2 = \det \mathcal{W} = \vec{V}^2$, ce qui montre que la transformation conserve la longueur des vecteurs. C'est donc une rotation, ou une rotation fois une opération parité.

**5.** Comme $\mathcal{W}$ est hermitien et de trace nulle, car

$$\mathrm{Tr}\,(U\mathcal{V}U^{-1}) = \mathrm{Tr}\,\mathcal{V}$$

on peut écrire $\mathcal{W} = \vec{\sigma} \cdot \vec{W} = \vec{\sigma} \cdot \vec{V}(\theta)$.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left[\vec{\sigma} \cdot \vec{V}(\theta)\right] = -\frac{\mathrm{i}}{2}[\vec{\sigma} \cdot \hat{n}, \vec{\sigma} \cdot \vec{V}(\theta)] = \vec{\sigma} \cdot (\hat{n} \times \vec{V}(\theta)$$

où nous avons utilisé (3.52), ce qui montre que $\vec{V}(\theta)$ se déduit de $\vec{V}$ par une rotation d'angle $\theta$ autour de $\hat{n}$

$$\frac{\mathrm{d}\vec{V}}{\mathrm{d}\theta} = \hat{n} \times \vec{V}(\theta)$$

À toute rotation $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ correspondent deux matrices $U_{\hat{n}}$ : $U_{\hat{n}}(\theta)$ et $U_{\hat{n}}(\theta + 2\pi) = -U_{\hat{n}}(\theta)$.

### 7.5.4 Algèbre de Lie d'un groupe continu

**1** Comme $g(\theta = 0) = I$, la loi de composition s'écrit

$$g(\overline{\theta})I = g(\overline{\theta}) = g(f(\overline{\theta}, 0) \Longrightarrow f_a(\overline{\theta}, 0) = \overline{\theta}_a$$

On écrit *a priori* un développement à l'ordre $\theta^2$ de $f_a(\overline{\theta}, \theta)$

$$f_a(\overline{\theta}, \theta) = \overline{\theta}_a + \theta_a + \lambda_{abc}\theta_b\theta_c + \overline{\lambda}_{abc}\overline{\theta}_b\overline{\theta}_c + f_{abc}\overline{\theta}_b\theta_c + O(\theta^3, \theta^2\overline{\theta}, \theta\,\overline{\theta}^2, \overline{\theta}^3)$$

la condition $f_a(\overline{\theta}, \theta = 0) = \overline{\theta}_a$ entraîne $\overline{\lambda}_{abc} = 0$ et de même $\lambda_{abc} = 0$.

**3.** On a d'une part, en négligeant les termes d'ordre $(\theta^3, \theta^2\overline{\theta}, \theta\,\overline{\theta}^2, \overline{\theta}^3)$

$$U(\overline{\theta})U(\theta) = I - \mathrm{i}\overline{\theta}_a T_a - \mathrm{i}\theta_a T_a - \frac{1}{2}(\overline{\theta}_b\overline{\theta}_c + \theta_b\theta_c)T_{bc} - \overline{\theta}_a\theta_b T_a T_b$$

et d'autre part,

$$U(f(\theta, \overline{\theta})) = I - \mathrm{i}T_a(\theta_a + \overline{\theta}_a + f_{abc}\overline{\theta}_b\theta_c) - \frac{1}{2}(\theta_b + \overline{\theta}_b)(\theta_c + \overline{\theta}_c)T_{bc}$$

En réétiquetant les indices de sommation et compte tenu de la propriété de symétrie $T_{bc} = T_{cb}$, car

$$T_{bc} = -\frac{\partial^2 U}{\partial\theta_a \partial\theta_b}\bigg|_{\theta_a = \theta_b = 0}$$

la comparaison des deux expressions donne

$$\overline{\theta}_b\theta_c T_b T_c = \mathrm{i}f_{abc}T_a\overline{\theta}_b\theta_c + \overline{\theta}_b\theta_c T_{bc}$$

On en déduit

$$\begin{aligned} T_b T_c &= T_{bc} + \mathrm{i} f_{abc} T_a \\ T_c T_b &= T_{bc} + \mathrm{i} f_{acb} T_a \end{aligned}$$

et en retranchant les deux équations

$$[T_b, T_c] = \mathrm{i}[f_{abc} - f_{acb}] T_a$$

La constante de structure $C_{abc}$ vaut

$$C_{abc} = [f_{abc} - f_{acb}] = -C_{acb}$$

### 7.5.5 Règle de somme de Thomas-Reiche-Kuhn

**1.** De la relation générale (voir(7.41)),

$$[X, f(P)] = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial f}{\partial P}$$

on tire

$$[P^2, X] = -2\mathrm{i}\hbar P \quad \text{et} \quad [[P^2, X], X] = -2\mathrm{i}[P, X] = -2\hbar^2$$

d'où

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V(X), X\right] = [H, X] = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{m} P \qquad [[H, X], X] = -\frac{\hbar^2}{m}$$

**2.** Par ailleurs, le commutateur s'exprime aussi comme

$$[[H, X], X] = HX^2 - 2XHX + X^2 H$$

et en utilisant $\langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle = E_n \delta_{nm}$

$$\begin{aligned} \langle \varphi_0 | H X^2 | \varphi_0 \rangle &= \sum_{n,m} \langle \varphi_0 | H | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | X | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | X | \varphi_0 \rangle = E_0 \sum_n |X_{n0}|^2 \\ \langle \varphi_0 | X H X | \varphi_0 \rangle &= \sum_{n,m} \langle \varphi_0 | X | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | X | \varphi_0 \rangle = \sum_n E_n |X_{n0}|^2 \end{aligned}$$

d'où le résultat

$$\sum_n \frac{2m |X_{n0}|^2}{\hbar^2} (E_n - E_0) = 1$$

### 7.5.8 Hamiltonien dans un champ magnétique

**1.** Ecrivons $\mathcal{L}$ sous la forme

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\sum_{i=1}^{3}\dot{x}_i^2 - q\overline{V}(\vec{r},t) + q\sum_{i=1}^{3}A_i(\vec{r},t)\dot{x}_i$$

où $i,k = x,y,z$. Ceci donne pour les dérivées partielles

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{x}_k} &= p_k = m\dot{x}_k + qA_k \\
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{x}_k} &= m\ddot{x}_k + q\sum_{i=1}^{3}(\partial_i A_k)\dot{x}_i \\
\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x_k} &= -q\partial_k\overline{V} - q(\partial_t A_k) + q\sum_{i=1}^{3}(\partial_k A_i)\dot{x}_i
\end{aligned}$$

d'où les équations du mouvement

$$m\ddot{x}_k = -q\partial_k\overline{V} - q\partial_t A_k + q\sum_{i=1}^{3}(\partial_k A_i - \partial_i A_k)\dot{x}_i$$

Transformons le dernier terme de cette équation en utilisant l'expression du champ magnétique[1]

$$\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A} \quad \text{ou} \quad B_l = \sum_{m,n}\varepsilon_{lmn}\partial_m A_n$$

où $\varepsilon_{ijk}$ est le tenseur complètement antisymétrique, soit (exercice 3.3.7)

$$\sum_l \varepsilon_{lki}B_l = \partial_k A_i - \partial_i A_k$$

On en déduit

$$\sum_i(\partial_k A_i - \partial_i A_k)\dot{x}_i = \sum_{i,l}\varepsilon_{lki}B_l\dot{x}_i = (\vec{v}\times\vec{B})_k$$

En remarquant que le champ électrique a pour composante $k$

$$E_k = -\partial_k\overline{V} - \partial_t A_k$$

nous obtenons la loi de Lorentz

$$m\frac{\mathrm{d}^2\vec{r}}{\mathrm{d}t^2} = q(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B})$$

1. On peut aussi utiliser une composante particulière, par exemple la composante $x$

$$(\partial_x A_y - \partial_y A_x)\,\dot{x} = B_z\dot{x}$$

# 20.8 Exercices du chapitre 8

## 8.6.2 Étalement du paquet d'ondes

**1.**

$$[P^2, X] = P[P, X] + [P, X]P = -2\mathrm{i}\hbar P$$

On peut aussi utiliser

$$[f(P), X] = -\mathrm{i}\hbar f'(P)$$

**2.** D'après le théorème d'Ehrenfest (4.26) en choisissant $A = X^2$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle X^2\rangle(t) &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle[H, X^2]\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Big\langle\Big[\frac{P^2}{2m} + V(X), X^2\Big]\Big\rangle \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2\hbar m}\langle[P^2, X^2]\rangle\end{aligned}$$

Mais

$$[P^2, X^2] = -2\mathrm{i}\hbar(XP + PX)$$

ce qui donne finalement

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle X^2\rangle(t) = \frac{1}{m}\langle XP + PX\rangle$$

En passant en représentation $x$

$$\langle PX\rangle = \int \mathrm{d}x\,\varphi^*(x)\left[-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\varphi(x)\right] = \mathrm{i}\int \mathrm{d}x x\varphi(x)\frac{\partial\varphi^*(x)}{\partial x}$$

où la seconde expression est obtenue par une intégration par parties. En combinant avec

$$\langle XP\rangle = \int \mathrm{d}x\,\varphi^*(x)x\left[-\mathrm{i}\frac{\partial\varphi(x)}{\partial x}\right]$$

on aboutit à

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle X^2\rangle(t) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,x\left[\varphi\frac{\partial\varphi^*}{\partial x} - \varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right]$$

Ces résultats sont valables pour une particule dans un potentiel, et pas seulement pour une particule libre.

**3.** En revanche, les résultats qui suivent ne sont valables que pour une *particule libre*, $V(X) = 0$. Le hamiltonien est alors le hamiltonien cinétique $H = K = P^2/(2m)$. On calcule la dérivée seconde de $\langle X^2\rangle(t)$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle X^2(t)\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle[K, X^2]\rangle = -\frac{1}{\hbar^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle[K, [K, X^2]]\rangle$$

où nous avons utilisé deux fois le théorème d'Ehrenfest. Compte tenu de

$$[P^2, XP + PX] = -4\mathrm{i}\hbar P^2$$

on trouve

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle X^2\rangle(t) = \frac{2}{m}\,\langle P^2\rangle$$

La dérivée troisième de $\langle X^2\rangle(t)$ et les dérivées d'ordre supérieur sont nulles

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}t^n}\langle X^2\rangle(t) = 0 \qquad\qquad n \geq 3$$

car $[K,[K,X^2]] \propto P^2$ et $[K,P^2]=0$. $\langle X^2\rangle(t)$ est donc un polynôme du second degré en $t$

$$\langle X^2\rangle(t) = \langle X^2\rangle(t=0) + t\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle X^2\rangle(t)\Big|_{t=0} + \frac{1}{2}\,t^2\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle X^2\rangle(t)\Big|_{t=0}$$

Pour calculer la dispersion, on utilise pour une particule libre

$$\Delta x^2(t) = \langle X^2\rangle(t) - [\langle X\rangle(t)]^2$$

et

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle X\rangle(t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[K,X] = \left\langle\frac{P}{m}\right\rangle$$

ce qui donne

$$\langle X\rangle(t) = \langle X\rangle(t=0) + t\left\langle\frac{P}{m}\right\rangle$$

car les dérivées d'ordre $\geq 2$ sont nulles.

### 8.6.3 Paquet d'ondes gaussien

On rappelle deux résultats sur les intégrales gaussiennes

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \qquad\qquad \Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha}$$

**1.** Posant $k' = k - \overline{k}$,

$$\int \mathrm{d}k|A(k)|^2 = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/2}\int \mathrm{d}k'\,\exp\left(-\frac{k'^2}{\sigma^2}\right) = 1$$

et $\Delta k = \sigma/\sqrt{2}$. Calculons la fonction d'onde au temps $t=0$

$$\begin{aligned}\varphi(x,0) &= \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\overline{k}x}\int\frac{\mathrm{d}k'}{\sqrt{2\pi}}\,\exp\left(\mathrm{i}k'x - \frac{k'^2}{2\sigma^2}\right)\\ &= \frac{\sigma^{1/2}}{\pi^{1/4}}\,\exp\left[\mathrm{i}\overline{k}x - \frac{1}{2}\,\sigma^2\,x^2\right]\end{aligned}$$

Le module carré de la fonction d'onde est

$$|\varphi(x,t)|^2 = \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}}\, \mathrm{e}^{-\sigma^2 x^2}$$

qui est bien normalisé à l'unité avec $\Delta x = 1/(\sqrt{2}\,\sigma)$, et donc

$$\Delta x\, \Delta k = \frac{1}{2}$$

**2.** On part de l'expression de $\varphi(x,t)$

$$\varphi(x,t) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \int \frac{\mathrm{d}k}{\sqrt{2\pi}}\, \exp\left(\mathrm{i}kx - \mathrm{i}\frac{\hbar k^2}{2m}\, t - \frac{(k-\overline{k})^2}{2\sigma^2}\right)$$

et on récrit l'exposant, à un facteur i près, avec $k' = k - \overline{k}$

$$kx - \frac{\hbar k^2}{2m}\, t - \frac{(k-\overline{k})^2}{2\sigma^2} = \overline{k}x + k'x - \frac{\hbar \overline{k}^2}{2m}\, t - \frac{\hbar \overline{k} k'}{m}\, t - \frac{\hbar k'^2}{2m}\, t - \frac{k'^2}{\sigma^2}$$

$\varphi(x,t)$ s'écrit

$$\begin{aligned}\varphi(x,t) \quad &= \quad \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \exp\left(\mathrm{i}\overline{k}x - \mathrm{i}\frac{\hbar \overline{k}^2}{2m}\, t\right) \int \frac{\mathrm{d}k'}{\sqrt{2\pi}} \\ &\quad \times \exp\left[\mathrm{i}k'\left(x - \frac{\hbar \overline{k}}{2m}\, t\right)\right]\, \exp\left[-\frac{k'^2}{2}\left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}\right)\right]\end{aligned}$$

Si l'on peut négliger le terme $\mathrm{i}\hbar t/m$ dans la seconde exponentielle, on obtient simplement

$$\begin{aligned}\varphi(x,t) \quad &= \quad \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \exp\left(\mathrm{i}\overline{k}x - \mathrm{i}\frac{\hbar \overline{k}^2}{2m} t\right) \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}\left(x - \frac{\hbar \overline{k}}{m}\, t\right)^2\right] \\ &= \quad \exp\left(\mathrm{i}\frac{\hbar \overline{k}^2}{2m}\, t\right) \varphi(x - v_g t, 0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(\overline{k})t} \varphi(x - v_g t, 0)\end{aligned}$$

**3.** Pour le calcul général, on pose

$$\frac{1}{\sigma'^2} = \frac{1}{\sigma^2} + \frac{\mathrm{i}\hbar t}{m}$$

et on trouve, en effectuant l'intégrale

$$\varphi(x,t) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \sigma' \exp\left(-\frac{1}{2}\sigma'^2 (x - v_g t)^2\right) \exp\left[\mathrm{i}(\overline{k}x - \omega(\overline{k})t)\right]$$

Prenant le module carré,

$$|\varphi(x,t)|^2 = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/2} |\sigma'|^2 \exp\left(-\mathrm{Re}\,\sigma'^2(x - v_g t)^2\right)$$

Le pic de $|\varphi(x,t)|^2$ est centré à $x = v_g t$ avec une largeur

$$\Delta x^2(t) = \frac{1}{2\,\mathrm{Re}\,\sigma'^2}$$

soit

$$\Delta x^2(t) = \frac{1}{2\sigma^2}\left(1 + \frac{\hbar^2\sigma^4 t^2}{m^2}\right)$$

La largeur du paquet d'ondes augmente avec le temps, en raison du terme $\hbar^2\sigma^4 t^2/m^2$ dans la parenthèse.

**4.** $\Delta x^2(t)$ double pour

$$t = \frac{m}{\hbar\sigma^2} = \frac{2m\Delta x^2(t=0)}{\hbar} = 3.2 \times 10^{-11}\,\mathrm{s}$$

## 8.6.7 Potentiel en fonction $\delta$

**1.** La dimension de $\delta(x)$ est $\mathcal{L}^{-1}$ et si $g$ a pour dimension l'inverse d'une longueur, la dimension de $V(x)$ est

$$\mathcal{M}^2\mathcal{L}^4\mathcal{T}^{-2}\mathcal{M}^{-1}\mathcal{L}^{-1}\mathcal{L}^{-1} = \mathcal{M}\mathcal{L}^2\mathcal{T}^{-2}$$

ce qui est bien la dimension d'une énergie.

**2.** On intègre l'équation de Schrödinger écrite sous la forme

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right]\varphi(x) = g\,\delta(x)\,\varphi(x)$$

entre $x = -\varepsilon$ et $x = +\varepsilon$

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \varphi''(x)\mathrm{d}x = \varphi'(-\varepsilon) - \varphi'(-\varepsilon) = g\varphi(0)$$

La fonction $\varphi(x)$ est continue à $x = 0$ mais sa dérivée $\varphi'(x)$ ne l'est pas. Dans le cas d'un état lié, on doit avoir

$$\varphi(x) = A\mathrm{e}^{-\kappa|x|} \quad \text{pour} \quad x \neq 0$$

On a donc

$$\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = -2\kappa A = -|g|\varphi(0) = -|g|A$$

d'où $2\kappa = |g|$ et la valeur de $E$

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 g^2}{8m}$$

Il n'y a pas de solution impaire car $\varphi(0) = 0$ pour une solution impaire. Retrouvons le résultat en prenant la limite $a \to 0$, $V_0 a \to \hbar^2 g/(2m)$ du puits carré dont les niveaux d'énergie correspondant à une fonction d'onde paire sont donnés par (8.79)

$$\kappa = k \tan\frac{ka}{2}$$

ce qui donne

$$k \simeq \frac{\sqrt{2m|V_0|}}{\hbar} \qquad \tan\frac{ka}{2} \simeq \tan\frac{\sqrt{2m|V_0|}a}{2\hbar} \to 0$$

et

$$\kappa \simeq \frac{\sqrt{2m|V_0|}}{\hbar}\,\frac{\sqrt{2m|V_0|}\,a}{2\hbar} = \frac{m|V_0|a}{\hbar^2} = \frac{m}{\hbar^2}\,\frac{\hbar^2|g|}{2m} = \frac{1}{2}\,|g|$$

**3.** Comme le potentiel de la molécule diatomique est pair, on cherche des solutions paires et des solutions impaires. Pour les solutions paires,

$$x < -l \;:\; \varphi(x) = \mathrm{e}^{\kappa x} \quad -l < x < l \;:\; \varphi(x) = A\cosh\kappa x \qquad x > l \;:\; \varphi(x) = \mathrm{e}^{-\kappa x}$$

La continuité de $\varphi$ au point $x = l$ donne

$$A\cosh\kappa l = \mathrm{e}^{-\kappa l}$$

et la continuité de la dérivée au même point

$$-\kappa\mathrm{e}^{-\kappa l} - A\kappa\sinh\kappa l = -|g|\mathrm{e}^{-\kappa l}$$

On remarque que

$$A\sinh\kappa l = A\cosh\kappa l\tanh\kappa l = \mathrm{e}^{-\kappa l}\tanh\kappa l$$

d'où l'équation donnant la valeur propre de l'énergie

$$(1 + \tanh\kappa l) = \frac{|g|}{\kappa}$$

La solution est unique et donnée par l'intersection des courbes $(1 + \tanh\kappa l)$ et $g/\kappa$ tracées en fonction de $\kappa$. On peut récrire la valeur de $\kappa$

$$\kappa = \frac{|g|}{2}\left(1 + \mathrm{e}^{-2\kappa l}\right)$$

Cherchons maintenant les solutions impaires, qui sont de la forme

$$x < -l \;:\; \varphi(x) = -\mathrm{e}^{\kappa x} \quad -l < x < l \;:\; \varphi(x) = A\sinh\kappa x \quad x > l \;:\; \varphi(x) = \mathrm{e}^{-\kappa x}$$

La condition de continuité de $\varphi(x)$ et la condition sur sa dérivée à $x = l$ sont maintenant

$$\begin{aligned} A\sinh\kappa l &= \mathrm{e}^{-\kappa l} \\ -\kappa\mathrm{e}^{-\kappa l} - A\kappa\cosh\kappa l &= -|g|\mathrm{e}^{-\kappa l} \end{aligned}$$

ce qui donne

$$\kappa = \frac{|g|}{2}\left(1 - \mathrm{e}^{-2\kappa l}\right)$$

Cette équation a une solution et une seule si la dérivée de $|g|[1 - \exp(-2\kappa l)]/2 > \kappa$ à $\kappa = 0$, c'est-à-dire si $|g|l > 1$. Il n'y pas de solution impaire si $|g|l < 1$.

**4.** On considère deux puits de potentiel profonds et étroits de largeur $a$ distants de $l$, avec $a \ll l$. On approxime donc les deux puits par des fonctions delta, ce qui ramène au potentiel de la question précédente, et on suppose $\kappa l \gg 1$. Dans ces conditions, il existe deux états liés, l'un pair d'énergie correspondant à

$$\kappa_+ = \frac{|g|}{2}(1 + \mathrm{e}^{-2\kappa l})$$

et l'autre impair d'énergie correspondant à

$$\kappa_- = \frac{|g|}{2}(1 - \mathrm{e}^{-2\kappa l})$$

La différence d'énergie entre les deux états est donc

$$E_- - E_+ = -\frac{\hbar^2}{2m}(\kappa_-^2 - \kappa_+^2) = \frac{\hbar^2}{2m}\, g^2 \mathrm{e}^{-2\kappa l}$$

l'énergie moyenne $E_0$ étant

$$E_0 = \frac{1}{2}(E_+ + E_-) \simeq -\frac{\hbar^2 g^2}{8m}$$

On peut donc écrire

$$\begin{aligned} E_+ &\simeq -\frac{\hbar^2 g^2}{8m}\left(1 + 2\mathrm{e}^{-2\kappa l}\right) \\ E_- &\simeq -\frac{\hbar^2 g^2}{8m}\left(1 - 2\mathrm{e}^{-2\kappa l}\right) \end{aligned}$$

Ce sont les valeurs propres d'un hamiltonien à deux niveaux

$$H = -\frac{\hbar^2 g^2}{8m}\begin{pmatrix} 1 & -2\mathrm{e}^{-2\kappa l} \\ -2\mathrm{e}^{-2\kappa l} & 1 \end{pmatrix}$$

D'après (12.109), le coefficient de transmission par effet tunnel d'une particule d'énergie $\simeq 0$ par une barrière de hauteur $V_0$ et de largeur $2l$ est

$$T \simeq \mathrm{e}^{-4\kappa l}$$

et les éléments non diagonaux du hamiltonien sont $\simeq \sqrt{T}$.

**5.** On écrit la fonction d'onde

$$\begin{aligned} x < 0 \quad &: \quad \varphi(x) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \\ x > 0 \quad &: \quad \varphi(x) = F\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + G\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \end{aligned}$$

en choisissant le cas $F = 1$, $G = 0$. La condition de continuité à $x = 0$ donne

$$A + B = 1$$

tandis que la condition sur la dérivée est

$$\mathrm{i}k - \mathrm{i}k(A - B) = g$$

On en tire

$$A = 1 + \frac{\mathrm{i}g}{2k} \qquad B = -\frac{\mathrm{i}g}{2k}$$

d'où les éléments de la matrice de passage

$$M_{11} = 1 + \frac{\mathrm{i}g}{2k} \qquad M_{12} = \frac{\mathrm{i}g}{2k}$$

**6.** La condition

$$\varphi_q(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}ql}\varphi_q(x - l)$$

donne

$$F\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + G\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}ql}\left(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-l)} + B\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x+l)}\right)$$

soit

$$F = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(q-k)} \qquad G = B\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(q+l)}$$

Les conditions de continuité de $\varphi_q(x)$ et la condition sur sa dérivée s'écrivent

$$\begin{aligned} A\left[1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}(q-k)l}\right] + B\left[1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}(q+k)l}\right] &= 0 \\ A\left[g + \mathrm{i}k\left(1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}(q-k)l}\right)\right] + B\left[g - \mathrm{i}k\left(1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}(q+k)l}\right)\right] &= 0 \end{aligned}$$

On obtient donc un système de deux équations à deux inconnues $A$ et $B$ dont le discriminant $\Delta$ doit être nul si l'on veut une solution non triviale. Posant $\alpha = (q - k)l$ et $\beta = (q + k)l$

$$\Delta = \det\begin{pmatrix} 1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} & 1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} \\ g + \mathrm{i}k\left(1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\right) & g - \mathrm{i}k\left(1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\right) \end{pmatrix} = 0$$

Le calcul de $\Delta$ donne

$$\Delta = g\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\right) - 2\mathrm{i}k\left(1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha+\beta)}\right) = 0$$

et en multipliant par $\exp(-\mathrm{i}ql)$

$$2\mathrm{i}g\sin kl - 4\mathrm{i}k(\cos ql - \cos kl) = 0$$

On retrouve bien (8.108)

$$\cos ql = \cos kl + \frac{g}{2k}\,\sin kl$$

### 8.6.12 Étude de l'expérience de Stern-Gerlach

**1.** Comme le plan $yOz$ est un plan de symétrie, $B_z$ doit être une fonction paire de $x$ et on doit avoir

$$\left.\frac{\partial B_z}{\partial x}\right|_{x=0} = 0$$

Par invariance par translation le long de $Oy$

$$\left.\frac{\partial B_z}{\partial y}\right|_{x=0} = 0$$

Les deux composantes non nulles du champ magnétique sont, au voisinage de $x = 0$

$$B_x = -bx \qquad B_z = B_0 + bz$$

Ce champ vérifie bien les deux équations de Maxwell (1.8) et (1.9) dans le vide $\vec{\nabla} \times \vec{B} = 0$ et

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = \frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_z}{\partial z} = -b + b = 0$$

L'énergie potentielle est

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_x B_x - \mu_z B_z = b\mu_x x - b\mu_z z$$

d'où la force $\vec{F}$ de composantes

$$F_x = \frac{\partial(-\vec{\mu} \cdot \vec{B})}{\partial x} = b\mu_x \qquad F_z = \frac{\partial(-\vec{\mu} \cdot \vec{B})}{\partial z} = -b\mu_z$$

Le terme $B_0\hat{z}$ du champ magnétique a pour effet une précession de Larmor du spin autour de l'axe $Oz$ (§ 3.2.5) où $\mu_z$ reste constant. En revanche, en raison de cette précession, la valeur moyenne de $\mu_x$ est nulle : $\langle \mu_x \rangle = 0$, et la force suivant $Ox$ se moyenne à zéro si le temps de transit est $\gg 1/\omega$, car le spin effectue un grand nombre de révolutions autour de $Oz$.

**2.** La force sur le moment magnétique est verticale et constante ; elle vaut $F = \pm\mu b$ pour un spin orienté suivant $\pm\hat{z}$. L'écart entre les trajectoires d'un spin orienté vers le haut et d'un spin orienté vers le bas à la sortie de l'entrefer est donc

$$\delta = 2\,\frac{1}{2}\,\frac{F}{m}\,t^2 = \frac{F}{m}\left(\frac{L}{v}\right)^2 = \frac{\mu b}{m}\left(\frac{L}{v}\right)^2$$

Évaluons aussi le produit $\Delta z \Delta p_z$

$$\Delta z \Delta p_z \sim \left(10^{-4}\right)\left(1.8 \times 10^{-25}\right)(10) = 1.8 \times 10^{-28}\,\text{MKSA} \sim 10^6\hbar$$

La description par des trajectoires classiques est bien légitime.

**3.** L'énergie potentielle effective d'un spin orienté vers le haut (vers le bas) est $-\mu bz$, et les équations de Schrödinger pour $\varphi_\pm$ sont

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi_\pm}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \mp \mu bz\right)\varphi_\pm = H\varphi_\pm$$

En utilisant le théorème d'Ehrenfest (4.26),

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\vec{R}_\pm\rangle(t) &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H,\vec{R}_\pm] = \frac{1}{m}\langle\vec{P}_\pm\rangle \\
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle P_{x,y,\pm}\rangle(t) &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H,P_{x,y,\pm}] = 0 \\
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle P_{z,\pm}\rangle(t) &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H,P_{z,\pm}] = \pm\mu b
\end{aligned}$$

Ce dernier résultat se déduit de

$$\mp[\mu bZ, P_z] = \mp\mathrm{i}\hbar\mu b$$

On en déduit

$$\langle Z_\pm\rangle = \pm\frac{\mu b}{2m}\,t^2$$

et le centre du paquet d'ondes suit donc le mouvement classique.

**4.** Effectuons une réflexion par rapport au plan $xOy$. Dans cette réflexion, $\vec{\mu}$ ne change pas, car l'orientation d'une boucle de courant située dans le plan $xOy$ est inchangée. Dans cette même opération, $\vec{B}$ change de sens, mais pas le gradient, et donc $\vec{\nabla}B$ est dirigé suivant $-\hat{x}$. Mais l'image de la trajectoire dans le miroir part toujours dans la direction $+\hat{x}$, et donc l'image de l'expérience dans le miroir n'est pas physiquement possible, sauf si la trajectoire n'est pas déviée.

## 8.6.13 Modèle de mesure de von Neumann

**1.** L'opérateur d'évolution $U(t,t_0)$ vérifie d'après (4.17)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t,t_0) = [g(t)AP]\,U(t,t_0)$$

qui s'intègre en

$$U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}AP\int_{t_0}^{t} g(t')\mathrm{d}t'\right)$$

Entre les instants $t_i$ et $t_f$, on a donc

$$U(t_f,t_i) \simeq \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}AP\int_{-\infty}^{+\infty} g(t')\mathrm{d}t'\right) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,gAP\right)$$

**2.** L'action de $U(t_f, t_i)$ sur le vecteur $|n \otimes \varphi\rangle$ est

$$U(t_f, t_i)|n \otimes \varphi\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ga_n P/\hbar}|n \otimes \varphi\rangle$$

Mais $\exp(-\mathrm{i}ga_n P/\hbar)$ est un opérateur de translation de $ga_n$ et d'après (8.13),

$$\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ga_n P/\hbar}\varphi\right)(x) = \varphi(x - ga_n)$$

**3.** D'après la linéarité de la mécanique quantique, le vecteur d'état final est

$$|\chi_f\rangle = \sum_n c_n |n \otimes \varphi_n\rangle$$

L'opérateur statistique réduit de $S$ est d'après (11.15),

$$\rho^{(1)} = \sum_{n,m} c_n c_m^* |m\rangle\langle n|\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \sum_n |c_n|^2 |n\rangle\langle n|$$

parce que $\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \delta_{nm}$. Le système $S$ est donc un mélange statistique d'états $|n\rangle$ avec un poids $|c_n|^2$, et la probabilité d'observer $S$ dans l'état $|n\rangle$ est $|c_n|^2$.

# 20.9 Exercices du chapitre 9

On rappelle que l'on utilise dans ce chapitre un système d'unités où $\hbar = 1$.

## 9.7.5 Moment angulaire orbital

**1.** D'après l'expression de l'opérateur moment angulaire orbital en fonction des opérateurs impulsion et position $\vec{R}$ et $\vec{P}$

$$\begin{aligned}
[L_x, L_y] &= [YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z] \\
&= [YP_z, ZP_x] + [ZP_y, XP_z] \\
&= \mathrm{i}[-YP_x + XP_y] = \mathrm{i}L_z
\end{aligned}$$

**2.** Partons de l'équation (*cf.* (9.40))

$$\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha L_x} f\right)(\vec{r}) = f\left(\mathcal{R}_{\hat{x}}^{-1}[\alpha](\vec{r})\right) = f\left(\mathcal{R}_{\hat{x}}[-\alpha](\vec{r})\right)$$

où $\mathcal{R}_{\hat{x}}[\alpha]$ est une rotation d'angle $\alpha$ autour de $Ox$. On prend $\alpha$ infinitésimal, $\alpha \to \alpha + \mathrm{d}\alpha$ ; dans une rotation d'angle $-\alpha$ autour de $Ox$

$$\begin{aligned}
y' &= z\sin\alpha + y\cos\alpha \qquad & \mathrm{d}y = z\mathrm{d}\alpha \\
z' &= z\cos\alpha - y\sin\alpha \qquad & \mathrm{d}z = -y\mathrm{d}\alpha
\end{aligned}$$

Dans cette rotation, $\theta \to \theta + \mathrm{d}\theta$ et $\phi \to \phi + \mathrm{d}\phi$, que l'on détermine par

$$\begin{aligned} \mathrm{d}y &= r\cos\theta\sin\phi\,\mathrm{d}\theta + r\sin\theta\cos\phi\,\mathrm{d}\phi \\ \mathrm{d}z &= -r\sin\theta\,\mathrm{d}\theta \end{aligned}$$

ce qui donne

$$\mathrm{d}\theta = \sin\phi\,\mathrm{d}\alpha \qquad \mathrm{d}\phi = \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\,\mathrm{d}\alpha$$

Ceci permet d'identifier $L_x$

$$[-\mathrm{i}\mathrm{d}\alpha L_x f](\vec{r}) = \mathrm{d}\alpha\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right)f(\vec{r})$$

soit

$$L_x = \mathrm{i}\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

Pour calculer $L_y$, on peut utiliser la même méthode, ou bien se servir de la relation de commutation

$$L_y = -\mathrm{i}[L_z, L_x] = -\left[\frac{\partial}{\partial\phi}, L_x\right]$$

En tenant compte de

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial\phi}, f(\phi)\right] &= f'(\phi) \\ \left[\frac{\partial}{\partial\phi}, f(\phi)\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right] &= f'(\phi)\,\frac{\partial}{\partial\phi} \end{aligned}$$

on obtient

$$L_y = \mathrm{i}\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

**3.** L'opérateur $L_z = -\mathrm{i}\partial/\partial\phi$ est défini sur les fonctions périodiques $f(\phi) = f(\phi + 2\pi)$ et il est autoadjoint sur ce domaine (voir § 6.2.2). En revanche, la fonction $\phi f(\phi)$ n'est pas périodique et elle n'appartient pas au domaine de $L_z$. On ne peut donc pas définir $\phi L_z$ et écrire une relation de commutation entre $\phi$ et $L_z$. On ne peut pas non plus utiliser la méthode de l'exercice 8.7.1 car les bornes d'intégration contribuent aux intégrations par parties.

## 9.7.6 Relation entre les matrices de rotation et les harmoniques sphériques

**1.** La fonction $f(0, 0, z)$ est invariante par rotation autour de $Oz$. L'action de $\exp(-\mathrm{i}\alpha L_z)$ sur $f(0, 0, z)$ est équivalente à l'identité et donc $L_z f(0, 0, z) = 0$. En physique classique,

$$l_z = xp_y - yp_x$$

et $l_z = 0$ si $x = y = 0$, c'est-à-dire si la trajectoire de la particule suit l'axe des $z$.

Par définition,

$$\langle lm|\theta,\phi\rangle = Y_l^{m*}(\theta,\phi)$$

mais on a aussi

$$\begin{aligned}\langle lm|\theta,\phi\rangle &= \langle lm|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi L_z}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta L_y}|\theta=0,\phi=0\rangle \\ &= \sum_{l',m'}\langle lm|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi L_z}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta L_y}|'m'\rangle\langle l'm'|\theta=0,\phi=0\rangle\end{aligned}$$

en introduisant un système complet d'états

$$\sum_{l',m'}|l'm'\rangle\langle l'm'| = I$$

D'après le résultat de la question **1**,

$$\langle l'm'|\theta=0,\phi=0\rangle \propto \delta_{m'0}$$

et d'après (9.32),

$$\langle lm|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi L_z}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta L_y}|l',0\rangle = \delta_{l'l}D^{(l)}_{m0}(\theta,\phi)$$

En fait, on peut facilement obtenir le coefficient de proportionnalité car

$$\langle l'm'|\theta=0,\phi=0\rangle = \delta_{m'0}Y_l^0(\theta=0,\phi=0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

en utilisant (9.61) et la propriété $P_l(1) = 1$.

### 9.7.8 Puits sphérique

**1.** Posant $E = -B$ et ($\hbar = 1$)

$$k = \sqrt{2m(V_0 - B)} \qquad \kappa = \sqrt{2mB}$$

on écrit la fonction d'onde radiale dans l'onde $s$

$$r < R\ :\ u(r) = A\sin kr \qquad r > R\ :\ u(r) = B\mathrm{e}^{-\kappa r}$$

La continuité de la dérivée logarithmique donne la relation

$$k\cot kR = -\kappa$$

Comme dans le § 8.3.3, on définit $U = 2mV_0$ et $\kappa^2 = U - k^2$. L'équation aux valeurs propres devient

$$\cot kR = -\frac{\sqrt{U-k^2}}{k}$$

et ses solutions sont données par la figure 8.12 (traits pointillés) pour les solutions impaires du puits carré à une dimension. Il n'y a de solution que si $kR > \pi/2$.

**2.** Supposant l'énergie de liaison du deutéron $B \ll V_0$, prenant pour masse réduite la moitié de la masse du proton $m_p/2$ et rétablissant $\hbar$

$$\frac{m_p V_0 R^2}{\hbar^2} = \frac{\pi^2}{4}$$

On trouve numériquement $V_0 \simeq 100\,\mathrm{MeV} \gg B$.

**3.** L'équation d'onde radiale est

$$\left[-\frac{1}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}\right] u(r) = Eu(r)$$

qui est analogue à celle de l'atome d'hydrogène (9.86) avec $l(l+1)/(2m) \to A$ et $B \to e^2$.

### 9.7.13 Diffusion de la lumière

**1.** Si le photon est émis suivant l'axe $Oz$ avec une polarisation circulaire droite ($D$) ou gauche ($G$), par conservation du moment angulaire les deux amplitudes non nulles sont

$$a = \langle D, \theta = 0|T|j = 1, m = 1\rangle \qquad a' = \langle G, \theta = 0|T|j = 1, m = -1\rangle$$

Si la transition est dipolaire électrique, nous avons vu au § 9.5.2 que $a = a'$ (avec nos conventions de phase). On en déduit, en utilisant l'invariance par rotation de la transition, $[U(\mathcal{R}), T] = 0$

$$\begin{aligned}
a_D^{m=1}(\theta) &= \langle D, \theta|T|j = 1, m = 1\rangle = \langle D, \theta = 0|T\,U^\dagger[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)]|j = 1, m = 1\rangle \\
&= \langle D, \theta = 0|T|j = 1, m = 1\rangle\langle j = 1, m = 1|U^\dagger[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)]|j = 1, m = 1\rangle \\
&= a d_{11}^{(1)}(\theta) = \frac{1}{2}\,a(1 + \cos\theta)
\end{aligned}$$

On trouve de même

$$a_G^{m=1}(\theta) = a d_{1,-1}^{(1)}(\theta) = \frac{1}{2}\,a(1 - \cos\theta)$$

Si le photon est émis dans la direction $\hat{n} = (\theta, \phi)$, il faut utiliser l'opérateur de rotation $U[\mathcal{R}(\theta, \phi)]$ et l'on obtient

$$\begin{aligned}
a_D^{m=1}(\theta, \phi) &= \frac{1}{2}\,a(1 + \cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \\
a_G^{m=1}(\theta, \phi) &= \frac{1}{2}\,a(1 - \cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}
\end{aligned}$$

**2.** Si l'atome absorbe le photon, les deux amplitudes non nulles sont, par conservation du moment angulaire

$$b = \langle j=1, m=1|T'|D\rangle \qquad b' = \langle j=1, m=-1|T'|G\rangle$$

Si la transition est dipolaire électrique, $b' = b$ d'après les résultats du § 9.5.2. En introduisant une somme d'états intermédiaires

$$c_{P\to P'}(\theta) = c_{P\to(jm)}c_{(jm)\to P'}(\theta) = \langle P', \theta|S|P\rangle = \sum_m \langle P', \theta|T|1m\rangle\langle 1m|T'|P\rangle$$

$$\begin{aligned}
\langle D, \theta|S|D\rangle &= \langle D, \theta|T|j=1, m=1\rangle\langle j=1, m=1|T'|D\rangle = \frac{1}{2}\,ab(1+\cos\theta) \\
\langle D, \theta|S|G\rangle &= \langle D, \theta|T|j=1, m=-1\rangle\langle j=1, m=-1|T'|G\rangle = \frac{1}{2}\,ab(1-\cos\theta) \\
\langle G, \theta|S|D\rangle &= \langle G, \theta|T|j=1, m=1\rangle\langle j=1, m=1|T'|D\rangle = \frac{1}{2}\,ab(1-\cos\theta) \\
\langle G, \theta|S|G\rangle &= \langle G, \theta|T|j=1, m=-1\rangle\langle j=1, m=-1|T'|G\rangle = \frac{1}{2}\,ab(1+\cos\theta)
\end{aligned}$$

Dans les deux cas, la distribution angulaire est

$$W(\theta) = \frac{1}{2}\,|a|^2|b|^2(1+\cos^2\theta)$$

Si le photon est initialement polarisé suivant $Ox$, on trouve

$$\begin{aligned}
\langle x, \theta|S|x\rangle &= ab\cos\theta \\
\langle y, \theta|S|x\rangle &= 0
\end{aligned}$$

Dans un modèle classique de diffusion d'un photon par une charge, un photon de polarisation linéaire suivant $Ox$ met la charge en mouvement suivant cet axe, et la charge rayonne une onde électromagnétique polarisée suivant $Ox$ avec une distribution angulaire $\propto \cos^2\theta$.
Si le photon est émis dans la direction $\hat{n} = (\theta, \phi)$, on trouve

$$\begin{aligned}
\langle D; \theta, \phi|S|D\rangle &= \frac{1}{2}\,ab(1+\cos\theta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \\
\langle D; \theta, \phi|S|G\rangle &= \frac{1}{2}\,ab(1-\cos\theta)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \\
\langle G; \theta, \phi|S|D\rangle &= \frac{1}{2}\,ab(1-\cos\theta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \\
\langle G; \theta, \phi|S|G\rangle &= \frac{1}{2}\,ab(1+\cos\theta)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}
\end{aligned}$$

Si le photon est initialement polarisé suivant $Ox$, on obtient les amplitudes suivantes

$$\begin{aligned}
\langle x; \theta, \phi|S|x\rangle &= ab\cos\theta\cos\phi \\
\langle y; \theta, \phi|S|x\rangle &= ab\sin\phi
\end{aligned}$$

Ces résultats se comprennent en remarquant que le cosinus de l'angle entre la polarisation initiale et la polarisation finale est $\cos\theta\cos\phi$ pour une polarisation finale $x$ et $\sin\phi$ pour une polarisation finale $y$.

### 9.7.14 Mesure du moment magnétique du $\Lambda^0$

**1.** La conservation du moment angulaire suivant $Oz$ implique $m' = m$, car la composante $z$ du moment angulaire orbital est nulle

$$\langle\theta = 0, m'|T|m\rangle \propto \delta_{mm'}$$

L'amplitude $b$ s'obtient à partir de $a$ par une réflexion par rapport au plan $xOz$ : $|a| = |b|$ si la parité est conservée.

**2.** Si le proton est émis suivant une direction faisant un angle $\theta$ avec l'axe $Oz$ dans le plan $xOz$, on peut calculer l'amplitude de désintégration en utilisant l'opérateur $U[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)]$ de rotation d'un angle $\theta$ autour de $Oy$

$$\begin{aligned}
\langle\theta, m'|T|m\rangle &= \langle\theta = 0, m'|U^\dagger[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)]T|m\rangle \\
&= \sum_{m''}\langle\theta = 0, m'|T|m''\rangle\langle m''|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_y}|m\rangle \\
&= a_{m',m'}(\theta = 0)d^{(1/2)}_{m'm}(\theta)
\end{aligned}$$

Avec les définitions de la question **1**,

$$a_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = a \qquad a_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = b$$

et compte tenu de (9.38),

$$a_{++}(\theta) = ad^{(1/2)}_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\theta) = a\cos\frac{\theta}{2} \qquad a_{-+}(\theta) = bd^{(1/2)}_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\theta) = -b\sin\frac{\theta}{2}$$

**3.** Si le $\Lambda^0$ est produit dans un état $m = 1/2$, la distribution angulaire $w(\theta)$ est (car les états finaux $m' - 1/2$ et $m' = -1/2$ sont discernables)

$$\begin{aligned}
w(\theta) &= |a|^2\cos^2\frac{\theta}{2} + |b|^2\sin^2\frac{\theta}{2} \\
&= \frac{1}{2}(|a|^2 + |b|^2) + \frac{1}{2}(|a|^2 - |b|^2)\cos\theta
\end{aligned}$$

et par conséquent,

$$w_0 = \frac{1}{2}(|a|^2 + |b|^2) \qquad \alpha = \frac{|a|^2 - |b|^2}{|a|^2 + |b|^2}$$

Si la parité était conservée, on aurait $|a|^2 = |b|^2$ et $\alpha = 0$. L'observation d'un terme en $\cos\theta$ dans la distribution angulaire de la désintégration est donc une preuve de la violation de la parité.

**4.** $\vec{p}\times\vec{p}_{\Lambda^0}$ est le seul pseudovecteur disponible, et $\langle\vec{S}\rangle$, qui est un pseudovecteur, doit nécessairement être orienté dans cette direction : $\langle S_x\rangle = \langle S_y\rangle = 0$.

**5.** Le hamiltonien du spin dans le champ magnétique est

$$H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\gamma\vec{S}\cdot\vec{B}$$

Le spin du proton précesse donc autour de $\vec{B}$ avec une vitesse angulaire $\omega = \gamma B$ dans le plan $xOz$. Au temps $t = \tau$, il aura donc tourné d'un angle

$$\lambda = \omega\tau = \gamma B\tau$$

L'angle de la désintégration doit être mesuré à partir de la direction $\hat{n}$ du plan $xOz$

$$\hat{n} = \hat{x}\sin\lambda + \hat{z}\cos\lambda$$

La direction d'émission du proton est

$$\hat{p} = \hat{x}\sin\theta\cos\phi + \hat{y}\sin\theta\sin\phi + \hat{z}\cos\theta$$

et

$$\cos\Theta = \hat{p}\cdot\hat{n} = \cos\theta\cos\lambda + \sin\theta\sin\lambda\cos\phi$$

La mesure de la distribution angulaire permet de remonter à la direction de $\hat{n}$ (ou à l'angle $\lambda$) et d'en déduire $\gamma$ par $\lambda = \gamma B\tau$.

## 9.7.15 Production et désintégration du méson $\rho^+$

**1.** Calcul de $a_m(\theta,\phi)$ : $\mathcal{R}(\theta,\phi)$ est la rotation (9.30) qui amène l'axe $Oz$ sur la direction d'émission du méson $\pi^+$

$$\begin{aligned} a_m(\theta,\phi) &= \langle\theta,\phi|T|m\rangle = \langle\theta=0,\phi=0|U^\dagger[\mathcal{R}(\theta,\phi)]T|m\rangle \\ &= \sum_{m'}\langle\theta=0,\phi=0|T|m'\rangle\langle m'|U^\dagger[\mathcal{R}(\theta,\phi)]|m\rangle \end{aligned}$$

où nous avons utilisé l'invariance par rotation $[U,T]=0$. Par conservation du moment angulaire,

$$\langle\theta=0,\phi=0|T|m'\rangle \propto \delta_{m'\,0} = a\delta_{m'\,0}$$

car si le méson $\pi^+$ part dans la direction $Oz$, son moment angulaire suivant cette direction est nul. D'autre part,

$$\begin{aligned} \langle m'=0|U^\dagger[\mathcal{R}(\theta,\phi)]|m\rangle &= \langle m|U[\mathcal{R}(\theta,\phi)]|m'=0\rangle^* = \left[D^{(1)}_{m0}(\theta,\phi)\right]^* \\ &= \mathrm{e}^{im\phi}\,d^{(1)}_{m0}(\theta) \end{aligned}$$

On obtient les différentes amplitudes de désintégration en utilisant (9.39)

$$\begin{aligned}
a_1(\theta,\phi) &= a\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} d^{(1)}_{10}(\theta) = -\frac{a}{\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin\theta \\
a_0(\theta,\phi) &= a\,d^{(1)}_{00}(\theta) = a\cos\theta \\
a_{-1}(\theta,\phi) &= a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} d^{(1)}_{-10}(\theta) = \frac{a}{\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\sin\theta
\end{aligned}$$

d'où les distributions angulaires

$$W_1 = W_{-1} = \frac{|a|^2}{2}\sin^2\theta \qquad W_0 = |a|^2\cos^2\theta$$

On note que $W_1 + W_0 + W_{-1} = |a|^2$ : en conséquence, si le méson $\rho$ n'est pas polarisé, la distribution angulaire est isotrope, ce qui est nécessaire car il n'y a pas de direction privilégiée. Par la suite, on normalisera $W$ par

$$W_1 + W_0 + W_{-1} = |a|^2 = 1$$

**2.** Si le vecteur d'état initial est donné par

$$|\lambda\rangle = \sum_{m=-1,0,1} c_m|1m\rangle \qquad \sum_{m=-1,0,1} |c_m|^2 = 1$$

l'amplitude de désintégration $a_\lambda$ sera

$$a_\lambda(\theta,\phi) = \langle\theta,\phi|T|\lambda\rangle = \sum_m \langle\theta,\phi|T|1m\rangle\langle 1m|\lambda\rangle = \sum_m c_m a_m(\theta,\phi)$$

et la distribution angulaire

$$W_\lambda(\theta,\phi) = \sum_{m,m'} c_m c^*_{m'} a_m(\theta,\phi) a^*_{m'}(\theta,\phi)$$

L'expression explicite de $W_\lambda$ est donnée à la question suivante.

**3.** Pour chaque composante du mélange statistique de poids $\mathsf{p}_\lambda$, la distribution angulaire est

$$W_\lambda = \sum_{m,m'} c^{(\lambda)}_m c^{*(\lambda)}_{m'} a_m(\theta,\phi) a^*_{m'}(\theta,\phi)$$

et la distribution angulaire correspondant à l'opérateur statistique $\rho$

$$\begin{aligned}
W_\rho(\theta) &= \sum_\lambda \mathsf{p}_\lambda W_\lambda = \sum_{\lambda,m,m'} \mathsf{p}_\lambda c^{(\lambda)}_m c^{*(\lambda)}_{m'} a_m(\theta,\phi) a^*_{m'}(\theta,\phi) \\
&= \sum_{m,m'} \rho_{mm'} a_m(\theta,\phi) a^*_{m'}(\theta,\phi)
\end{aligned}$$

On simplifie le calcul en remarquant que $\rho_{mm'} = \rho^*_{m'm}$

$$m \neq m' \qquad \rho_{mm'} a_m a^*_{m'} + \rho_{m'm} a_{m'} a^*_m = 2\mathrm{Re}\,(\rho_{mm'} a_m a^*_{m'})$$

Par exemple,

$$\mathrm{Re}\,(\rho_{10} a_1 a_0^*) = -\mathrm{Re}\,\left(\frac{\rho_{10}}{\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,\sin\theta\cos\theta\right)$$

Le résultat final est

$$\begin{aligned} W_\rho(\theta,\phi) &= \rho_{00}\cos^2\theta + \frac{1}{2}\sin^2\theta(\rho_{11}+\rho_{-1,-1}) \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{2}}\sin 2\theta\,\mathrm{Re}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\,\rho_{-10} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,\rho_{10}\right) - \sin^2\theta\,\mathrm{Re}\left(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\phi}\,\rho_{1,-1}\right) \end{aligned}$$

Pour obtenir la distribution angulaire de la question **2**, il suffit de remplacer $\rho_{11} \to |c_1|^2$, $\rho_{10} \to c_1 c_0^*$, etc.

**4.** Le seul pseudovecteur à notre disposition est $\hat{n}$, et $\langle \vec{J} \rangle$, qui est un pseudovecteur, est nécessairement dirigé suivant $\hat{n}$. En utilisant l'expression (9.24) de $J_x$ et $J_y$ pour $j = 1$, on trouve

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\,\rho J_x &= 2(\mathrm{Re}\,\rho_{10} + \mathrm{Re}\,\rho_{0,-1}) = 0 \\ \mathrm{Tr}\,\rho J_y &= 2(\mathrm{Im}\,\rho_{10} + \mathrm{Im}\,\rho_{0,-1}) = 0 \end{aligned}$$

soit $\rho_{10} + \rho_{0,-1} = 0$. Dans l'opération $\mathcal{Z}$, qui est une réflexion par rapport au plan $xOy$, la cinématique de la réaction est inchangée : comme la cible n'est pas polarisée et comme la parité est conservée, la réaction est identique à son image dans le plan $xOz$. On doit donc avoir

$$[\rho, \mathcal{Z}] = 0 \quad \text{ou} \quad \mathcal{Z}^{-1}\rho\mathcal{Z} = \rho$$

On utilise ensuite

$$\Pi|1m\rangle = \eta|1m\rangle$$

où $\eta$ est la parité du méson $\rho$ ($\eta = -1$ car le méson $\rho$ est, comme le photon, un méson vectoriel). On en déduit

$$\langle 1m|\Pi\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi J_z}\,\rho\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi J_z}\Pi|1m'\rangle = |\eta|^2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi(m'-m)}\rho_{mm'}$$

soit

$$\rho_{mm'} = (-1)^{m-m'}\,\rho_{mm'}$$

### 9.7.17 Désintégration du $\Sigma^0$

**1.** Si le photon est émis suivant l'axe $Oz$, la composante suivant cet axe du moment angulaire orbital est nulle, et la conservation du moment angulaire est assurée pour les amplitudes $a$ et $b$, mais non pour $c$ et $d$, qui sont donc nulles.

**2.** Les amplitudes $a$ et $b$ se déduisent l'une de l'autre par une réflexion par rapport au plan $xOz$, et si la parité est conservée dans la désintégration, alors $|a| = |b|$. L'opération de réflexion $\mathcal{Y}$ (9.100) agit de la façon suivante sur les états du photon dont la parité est impaire, $\eta_\gamma = -1$ (voir (9.104))

$$\mathcal{Y}|D\rangle = -|G\rangle \qquad \mathcal{Y}|G\rangle = -|D\rangle$$

tandis que pour le $\Sigma^0$ et $\Lambda^0$ (voir (9.102))

$$\begin{aligned}\mathcal{Y}|jm\rangle &= \eta_\Sigma(-1)^{1/2-m}|j,-m\rangle \\ \mathcal{Y}|jm'\rangle &= \eta_\Lambda(-1)^{1/2-m'}|j,-m'\rangle\end{aligned}$$

et comme $m' = -m$, on obtient un facteur global

$$\eta_\Sigma\eta_\Lambda\eta_\gamma(-1)^{1-m-m'} = \eta_\Sigma\eta_\Lambda = \eta$$

On peut aussi utiliser directement (9.119)

$$\eta_\Sigma\eta_\lambda\eta_\gamma(-1)^{j_\Sigma-j_\Lambda-j_\gamma} = \eta$$

La transition est dipolaire magnétique car les parités de l'état initial et de l'état final sont les mêmes.

**3.** Si $\vec{p}$ est l'impulsion du photon, l'amplitude d'émission du $\Lambda^0$ dans la direction $-\hat{p}$ avec une projection du spin $m'$ sur $\hat{p}$ lorsque le photon est polarisé circulairement à droite est

$$\begin{aligned}a_D^{m'}(\theta) &= \langle D,m';\theta|T|m=1/2\rangle \\ &= \langle D,m';\theta=0|U^\dagger[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)]|m=1/2\rangle \\ &= \sum_{m''}\langle D,m';\theta=0|T|m''\rangle\langle m''|U^\dagger[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)]|1/2\rangle \\ &= a\,d^{(1/2)}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\theta) = a\cos\frac{\theta}{2}\end{aligned}$$

car seule la valeur $m'' = 1/2$ donne une contribution non nulle. On a donc $m' = -1/2$. Un calcul analogue donne pour la polarisation circulaire gauche du photon

$$a_G^{m'}(\theta) = b\,d^{(1/2)}_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}(\theta) = -a\sin\frac{\theta}{2}$$

Seules les amplitudes $a_D^{m'=-1/2}(\theta)$ et $a_G^{m'=1/2}(\theta)$ sont non nulles.

### 9.7.18 Coefficients de Clebsch-Gordan du couplage $\vec{L}\cdot\vec{S}$

Pour $j = l + 1/2$, d'après (9.18)

$$J_-\varphi(l+1/2,m) = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\;\varphi(l+1/2,m-1)$$

tandis que

$$\begin{aligned}(L_- - S_-)\psi(m-1/2,1/2) &= \sqrt{(l+m+1/2)(l-m+3/2)}\\ &\quad\times\psi(m-3/2,1/2)+\psi(m-1/2,-1/2)\\ (L_- - S_-)\psi(m+1/2,-1/2) &= \sqrt{(l+m+1/2)(l-m+1/2)}\\ &\quad\times\psi(m-1/2,-1/2)\end{aligned}$$

On identifie les coefficients de $\psi(m-3/2,1/2)$ et $\psi(m-1/2,-1/2)$

$$\alpha_{m-1}\sqrt{(l+m+1/2)(l-m+3/2)} = \alpha_m\sqrt{(l+m-1/2)(l-m+3/2)}$$

On simplifie par $\sqrt{l-m+3/2}$ pour obtenir la relation de récurrence entre $\alpha_m$ et $\alpha_{m-1}$. En identifiant le coefficient de $\psi(m-1/2,-1/2)$, on obtient

$$\beta_{m-1}\sqrt{(l+m+1/2)(l-m+3/2)} = \alpha_m + \beta_m\sqrt{(l+m+1/2)(l-m+1/2)}$$

soit

$$\beta_{m-1}\sqrt{l-m+3/2} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} + \beta_m\sqrt{l-m+1/2}$$

De $|\alpha_m|^2 + |\beta_m|^2 = 1$, on déduit

$$\beta_m = \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}}$$

et on vérifie que c'est bien le signe $+$ qui convient.

## 20.10 Exercices du chapitre 10

### 10.4.2 Propriétés mathématiques

**1.** On procède par récurrence en supposant $[N,a^p] = -pa^p$

$$[N,a^{p+1}] = [N,aa^p] = [N,a]a^p + a[N,a^p] = -(p+1)a^{p+1}$$

Considérons un monôme[2] en $a$ et $a^\dagger$, $P = (a^\dagger)^q a^p$ et calculons son commutateur avec $N$

$$[N,(a^\dagger)^q a^p] = [N,(a^\dagger)^q]a^p + (a^\dagger)^q[N,a^p] = (q-p)(a^\dagger)^q a^p$$

2. Lorsque l'on écrit une combinaison de $a$ et $a^\dagger$ avec tous les $a$ à droite et tous les $a^\dagger$ à gauche, on dit que l'on a écrit cette combinaison *sous forme normale* (§ 17.4.2).

qui s'annule seulement si $p = q$. Comme toute fonction de $a$ et $a^\dagger$ peut s'écrire comme une somme de tels monômes, en utilisant si nécessaire la relation de commutation $[a, a^\dagger] = I$ pour mettre les opérateurs de création et d'annihilation dans un ordre adéquat, on voit que la seule possibilité d'avoir un commutateur nul est que cette fonction soit une somme de termes de la forme $(a^\dagger)^p a^p$. Tout monôme de la forme $(a^\dagger)^p a^p$ peut s'écrire comme une fonction de $a^\dagger a$ en utilisant les relations de commutation (10.8). Si un opérateur $A$ commute avec $N$, c'est obligatoirement une fonction de $N$ : $A = f(N)$. Il n'existe pas d'opérateur indépendant de $N$ et commutant avec $N$ et

$$\langle n'|A|n\rangle = \langle n'|f(N)|n\rangle = f(n)\delta_{nn'}$$

**2.** Soit un vecteur $|\varphi\rangle$ orthogonal à tous les vecteurs $|n\rangle$, $\langle\varphi|n\rangle = 0\ \forall n$

$$\mathcal{P}'|n\rangle = |n\rangle \qquad \mathcal{P}'|\varphi\rangle = 0$$

Montrons que $[\mathcal{P}', a] = 0$. Il est évident que

$$\langle n|[\mathcal{P}', a]|n\rangle = 0 \qquad \langle\varphi|[\mathcal{P}', a]|\varphi\rangle = 0$$

Examinons $\langle\varphi|[\mathcal{P}', a]|n\rangle$ et $\langle\varphi|[\mathcal{P}', a^\dagger]|n\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle\varphi|\mathcal{P}'a|n\rangle &= \langle\varphi|\mathcal{P}'a^\dagger|n\rangle = 0 \\
\langle\varphi|a\mathcal{P}'|n\rangle &= \langle\varphi|a|n\rangle = \sqrt{n}\ \langle\varphi|n-1\rangle = 0 \\
\langle n|a^\dagger\mathcal{P}'|n\rangle &= \langle n|a^\dagger|\varphi\rangle = \sqrt{n+1}\ \langle\varphi|n+1\rangle = 0
\end{aligned}$$

et donc $[\mathcal{P}', a] = 0$ et $[\mathcal{P}', a^\dagger] = 0$. Le projecteur $\mathcal{P}'$ commute donc avec $a$ et $a^\dagger$, et d'après le théorème de von Neumann, c'est un multiple de l'identité, soit $\mathcal{P}' = I$, soit $\mathcal{P}' = 0$. La seconde éventualité étant exclue, reste $\mathcal{P}' = I$.

### 10.4.3 États cohérents

**2.** En utilisant le théorème d'Ehrenfest (4.26)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle a\rangle(t) = \langle[a, H]\rangle = \hbar\omega\langle a\rangle(t)$$

car $[a, H] = \hbar\omega a$. Si la condition initiale est

$$\langle a\rangle(t=0) = \langle\varphi(0)|a|\varphi(0)\rangle = z_0$$

la solution de l'équation différentielle ci-dessus est

$$\langle a\rangle(t) = z_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$$

**3.** On veut, en outre, que $\langle\varphi(0)|a^\dagger a|\varphi(0)\rangle = |z_0|^2$, ce qui implique, avec $b(z_0) = a - z_0$

$$\begin{aligned}
\langle\varphi(0)|b^\dagger(z_0)b(z_0)|\varphi(0)\rangle &= \langle\varphi(0)|a^\dagger a|\varphi(0)\rangle - z_0\langle\varphi(0)|a^\dagger|\varphi(0)\rangle \\
&\quad -z_0^*\langle\varphi(0)|a|\varphi(0)\rangle + |z_0|^2 \\
&= \langle\varphi(0)|(a^\dagger a - |z_0|^2)|\varphi(0)\rangle = ||b(z_0)\varphi(0)||^2 = 0
\end{aligned}$$

ce qui n'est possible que si $b(z_0)|\varphi(0)\rangle = 0$ : $|\varphi(0)\rangle$ est vecteur propre de $b(z_0)$ avec la valeur propre 0

$$b(z_0)|\varphi(0)\rangle = 0 \quad \text{soit} \quad a|\varphi(0)\rangle = z_0|\varphi(0)\rangle$$

**4.** On utilise (2.72)

$$\mathrm{e}^A\,\mathrm{e}^B = \mathrm{e}^{A+B}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}[A,B]}$$

avec

$$A = \frac{c}{\sqrt{2}}\,(z - z^*)(a + a^\dagger) \qquad\qquad B = \frac{c'}{\sqrt{2}}\,(z + z^*)(a - a^\dagger)$$

et

$$c = -c' = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad\qquad A + B = -z^*a + za^\dagger$$

L'égalité (2.72) est valable parce que $[A, B]$ est un multiple de l'identité qui commute avec $A$ et $B$. On utilise un système d'unités tel que

$$\hbar = m\omega = 1$$

ou de façon équivalente, on utilise les opérateurs $\hat{Q}$ et $\hat{P}$ de (11.4) au lieu de $Q$ et $P$

$$[A, B] = -\frac{\mathrm{i}}{2}(z - z^*)(z + z^*)[Q, P] = \frac{1}{2}(z^2 - z^{*2})$$

On doit donc choisir

$$f(z, z^*) = \exp\left(-\frac{1}{4}\left[z^2 - z^{*2}\right]\right)$$

Dans ces conditions, la fonction d'onde de l'état cohérent $\varphi_z(q)$ en représentation $q$ est

$$\begin{aligned}\varphi_z(q) = \langle q|D(z)|0\rangle \quad &= \quad \exp\left(-\frac{1}{4}\left[z^2 - z^{*2}\right]\right)\exp\left(\frac{1}{\sqrt{2}}[z - z^*]q\right) \\ &\quad\; \times\langle Q|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}[z + z^*]P\right)|0\rangle \\ &= \quad \exp\left(-\frac{1}{2}\left[z^2 - z^{*2}\right]\right)\exp\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left[z - z^*\right]q\right) \\ &\quad\; \times\varphi_0\left(q - \frac{1}{\sqrt{2}}[z + z^*]\right)\end{aligned}$$

où $\varphi_0(q)$ est la fonction d'onde (10.23) de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. D'après (10.37), les valeurs moyennes de $Q$ et de $P$ sont

$$\langle Q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(z + z^*) \qquad\qquad \langle P\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\sqrt{2}}(z - z^*)$$

et on peut récrire le résultat précédent

$$\varphi_z(q) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2}\langle Q\rangle\langle P\rangle\right) \exp\left(\mathrm{i}\langle P\rangle q\right) \exp\left(-\frac{1}{2}(q-\langle Q\rangle)^2\right)$$

En rétablissant les facteurs dimensionnés

$$\varphi_z(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\langle Q\rangle\langle P\rangle\right) \exp\left(\mathrm{i}\frac{\langle P\rangle q}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\,\frac{m\omega}{\hbar}\,(q-\langle Q\rangle)^2\right)$$

Le facteur de phase global

$$\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\langle Q\rangle\langle P\rangle\right)$$

est physiquement non pertinent et peut être omis.

**5.** On écrit, avec $z = \rho\exp(\mathrm{i}\theta)$ et $A_{nm} = \langle n|A|m\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle z|A|z\rangle &= \sum_{n,m}\langle z|n\rangle\langle n|A|m\rangle\langle m|z\rangle \\
&= \mathrm{e}^{-|z|^2}\sum_{n,m}\frac{A_{nm}z^m z^{*n}}{\sqrt{n!m!}} \\
&= \mathrm{e}^{-\rho^2}\sum_{n,m}\frac{A_{nm}}{\sqrt{n!m!}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-n)\theta}\,\rho^{n+m}
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé (10.31)

$$\langle m|z\rangle = \mathrm{e}^{-|z|^2/2}\frac{z^m}{\sqrt{m!}}$$

Écrivant le développement de $\langle z|A|z\rangle$ sous une forme générale

$$\langle z|A|z\rangle = \mathrm{e}^{-\rho^2}\sum_{q=0}^{\infty}\sum_{p=-\infty}^{\infty} c_{pq}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p\theta}\,\rho^q$$

on déduit

$$c_{pq} = \frac{1}{q!}\int\frac{\mathrm{dRe}\,z\mathrm{Im}\,z}{\pi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\theta}\,\langle z|A|z\rangle$$

et on peut faire l'identification

$$A_{nm} = \sqrt{n!m!}\,c_{m-n,m+n}$$

avec $(m-n)$ et $(m+n)$ entiers, $(m+n)\geq 0$. On peut donc à partir de $\langle z|A|z\rangle$ obtenir tous les éléments de matrice $A_{mn}$.

### 10.4.4 Couplage à une force classique

**1.** D'après (10.68),

$$\tilde{a}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t/\hbar}\, a\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t/\hbar} = a\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \qquad \tilde{a}(t=0) = a$$

d'où

$$\tilde{a}(t) = a\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \qquad \tilde{a}^\dagger(t) = a^\dagger\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$$

la formule pour $\tilde{a}^\dagger$ s'obtenant par conjugaison hermitienne. L'équation différentielle (4.44) pour $\tilde{U}(t)$ devient

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\tilde{U}}{\mathrm{d}t} = -\left(a\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + a^\dagger\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right) f(t)\tilde{U}(t) = \tilde{W}(t)\tilde{U}(t)$$

avec la condition aux limites $\tilde{U}(t=0) = I$.

**2.** Divisons l'intervalle $[0,t]$ en $n \gg 1$ intervalles infinitésimaux $\Delta t$ ; pour un temps $\Delta t$ infinitésimal, l'opérateur d'évolution $\tilde{U}(t_j+\Delta t, t_j)$ est donné par

$$\tilde{U}(t_j+\Delta t, t_j) \simeq \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta t \tilde{W}(t_j)/\hbar}$$

avec

$$-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\Delta t \tilde{W}(t_j) = \left[\mathrm{i}f(t_j)a^\dagger\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_j} + \mathrm{i}f(t_j)a\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_j}\right] = \zeta_j a^\dagger - \zeta_j^* a$$

où

$$\zeta_j = \mathrm{i}\Delta t f(t_j)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_j}$$

L'opérateur d'évolution $\tilde{U}(t)$ est

$$\tilde{U}(t) = \prod_{j=0}^{n-1} \exp\left(\zeta_j a^\dagger - \zeta_j^* a\right) = \prod_{j=0}^{n-1} D(\zeta_j)$$

où $D(\zeta)$ est l'opérateur de déplacement (10.40). D'après (10.42),

$$\begin{aligned} D(\zeta_1)D(\zeta_0) &= \exp\left[\mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,\zeta_1\zeta_0^*)\right] D(\zeta_1+\zeta_0) \\ D(\zeta_2)D(\zeta_1)D(\zeta_0) &= \exp\left[\mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,(\zeta_2(\zeta_1^*+\zeta_0^*)+\zeta_1\zeta_0^*)\right] D(\zeta_2+\zeta_1+\zeta_0) \end{aligned}$$

d'où le cas général

$$D(\zeta_{n-1})\cdots D(\zeta_1)D(\zeta_0) = \exp\left[\frac{1}{2\mathrm{i}}\sum_{j>i}(\zeta_j\zeta_i^* - \zeta_j^*\zeta_i)\right] D(\zeta_{n-1}+\cdots+\zeta_1+\zeta_0)$$

À la limite $\Delta t \to 0$, avec $\zeta(t) = \mathrm{i}f(t)\exp(\mathrm{i}\omega t)$

$$\sum_{j>i}(\zeta_j\zeta_i^* - \zeta_j^*\zeta_i) = \int \mathrm{d}t'\, \mathrm{d}t''\varepsilon(t'-t'')\zeta(t')\zeta^*(t'')$$

ce qui donne la phase $\Phi$. Par ailleurs, (10.42) donne

$$D(\zeta_{n-1}+\cdots+\zeta_1+\zeta_0)=\exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i,j}\zeta_i\zeta_j^*\right)\exp\left[(\zeta_{n_1}+\cdots\zeta_1+\zeta_0)\,a^\dagger\right]$$
$$\times\exp\left[(\zeta_{n-1}+\cdots\zeta_1+\zeta_0)^*\,a\right]$$

et à la limite où $t\to 0$

$$\begin{aligned}D&=\exp\left[-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}t'\,\mathrm{d}t''\zeta(t')\zeta^*(t'')\right]\exp[z(t)a^\dagger]\exp[z^*(t)a]\\&=\exp\left[-\frac{1}{2}|z(t)|^2\right]\exp[z(t)a^\dagger]\exp[z^*(t)a]\end{aligned}$$

**3.** Calculons l'intégrale dans le second terme de $D$ pour $t>t_2$

$$z(t)=\mathrm{i}\int_{t_1}^{t_2}f(t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t'}\,\mathrm{d}t'=\mathrm{i}\int_{-\infty}^{+\infty}f(t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t'}\,\mathrm{d}t'=\mathrm{i}\tilde{f}(\omega)$$

$z(t)$ est indépendant de $t$. Nous obtenons finalement un opérateur $\tilde{U}(t)$ indépendant de $t$ pour $t>t_2$

$$\tilde{U}(t)=\exp\left(\mathrm{i}a^\dagger\tilde{f}(\omega\right)\,\exp\left(\mathrm{i}a\tilde{f}^*(\omega\right)\,\exp(-\mathrm{i}\Phi)\,\exp\left(-\frac{1}{2}\,|\tilde{f}(\omega)|^2\right)$$

Ceci nous permet de calculer l'amplitude de transition $n\to m$

$$\begin{aligned}A_{mn}(t)&=\langle m|U(t)|n\rangle=\langle m|U_0(t)\tilde{U}(t)|n\rangle\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m t/\hbar}\,\langle m|\tilde{U}(t)|n\rangle\end{aligned}$$

Le résultat est particulièrement simple si l'oscillateur est dans son état fondamental au temps $t=0$ car $\tilde{U}(t)|0\rangle$ est alors un état cohérent $|z=\mathrm{i}\tilde{f}(\omega)\rangle$

$$\tilde{U}(t)|0\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Phi}\,\mathrm{e}^{-|\tilde{f}(\omega)|^2/2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}a^\dagger\tilde{f}(\omega)}|0\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Phi}\,|\mathrm{i}\tilde{f}(\omega)\rangle$$

La probabilité d'observer un état final $|m\rangle$ est donnée par une loi de Poisson (10.34)

$$\mathsf{p}(m)=\frac{\left(|\tilde{f}(\omega)|^2\right)^m\,\exp\left(-|\tilde{f}(\omega)|^2\right)}{m!}$$

### 10.4.5 Opérateur de phase

**1.** Écrivons $a=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Phi}$. Nous en déduisons $aa^\dagger=A^2$ et, compte tenu de $[a,a^\dagger]=I$

$$a^\dagger a+I=N+I=A^2$$

Il en résulte

$$\begin{aligned} A &= \sqrt{N+I} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\sqrt{n+1}\,\langle n| \\ A^{-1} &= (N+I)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\frac{1}{\sqrt{n+1}}\,\langle n| \end{aligned}$$

Comme $A^{-1}$ est défini, on peut écrire

$$\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\Phi} = A^{-1}\,a$$

Montrons que $\exp(\mathrm{i}\Phi)$ est précisément $E = \sum_n |n\rangle\langle n+1|$. Pour ce faire, comparons les éléments de matrice de $E$ et de $\exp(\mathrm{i}\Phi)$

$$\begin{aligned} \langle m|E|p\rangle &= \sum_n \langle m|n\rangle\langle n+1|p\rangle = \delta_{p,m+1} \\ \langle m|A^{-1}\,a|p\rangle &= \sum_n \langle m|n\rangle\frac{1}{\sqrt{n+1}}\langle n|a|p\rangle = \delta_{p,m+1} \end{aligned}$$

en utilisant (10.17).

**2.** Compte tenu de $[E,E^\dagger] = |0\rangle\langle 0|$, le commutateur $[C,S]$ vaut

$$[C,S] = -\frac{\mathrm{i}}{2}|0\rangle\langle 0|$$

et si l'état de l'oscillateur est $|\varphi\rangle$

$$\Delta_\varphi C\,\Delta_\varphi S \geq \frac{1}{4}\,|\langle\varphi|0\rangle|^2$$

Si la projection de $|\varphi\rangle$ sur le vide est nulle, alors $\Delta_\varphi C$ et $\Delta_\varphi S$ peuvent être simultanément nuls

$$C^2 + S^2 = I - |0\rangle\langle 0|$$

et si $\langle\varphi|0\rangle = 0$, alors les valeurs moyennes de $C^2$ et $S^2$ vérifient

$$\langle C^2\rangle_\varphi + \langle S^2\rangle_\varphi = 1$$

**3.** En suivant la méthode conduisant à (10.50), il est facile de calculer la valeur moyenne de $E$ dans l'état cohérent $|z\rangle$, $z = |z|\exp(\mathrm{i}\theta)$

$$\langle z|E|z\rangle = \mathrm{e}^{-|z|^2}\sum_n \frac{z^{2n+1}}{\sqrt{n!(n+1)!}} \simeq \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\theta}$$

### 10.4.7 Transformations de jauge non abéliennes

**1** L'expression de $\vec{\jmath}\,'$ est

$$\vec{\jmath}\,' = \Phi^\dagger \Omega^{-1}\left(-\mathrm{i}\vec{\nabla} - q\vec{\mathbf{A}}'\right)\Omega\Phi$$

Remarquons tout d'abord que

$$\nabla(\Omega\Phi) = (\vec{\nabla}\Omega)\Phi + \Omega\vec{\nabla}\Phi$$

On souhaite avoir $\vec{\jmath} = \vec{\jmath}\,'$

$$\vec{\jmath}\,' = \Phi^\dagger\left(-\mathrm{i}\vec{\nabla} - \mathrm{i}\Omega^{-1}(\vec{\nabla}\Omega) - q\,\Omega^{-1}\vec{\mathbf{A}}'\Omega\right)\Phi$$

d'où la condition

$$-\mathrm{i}\vec{\nabla} - q\vec{\mathbf{A}} = -\mathrm{i}\vec{\nabla} - \mathrm{i}\Omega^{-1}(\vec{\nabla}\Omega) - q\,\Omega^{-1}\vec{\mathbf{A}}'\Omega$$

soit

$$\vec{\mathbf{A}}' = \Omega\vec{\mathbf{A}}\Omega^{-1} - \frac{\mathrm{i}}{q}(\vec{\nabla}\Omega)\Omega^{-1}$$

Dans le cas abélien, le champ $\vec{A}$ est un nombre, et non une matrice

$$\Omega\vec{A}\Omega^{-1} = \vec{A}$$

et on retrouve

$$\vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla}\Lambda$$

**2.** Choisissons une transformation de jauge infinitésimale

$$\Omega = I - \mathrm{i}q\sum_a \Lambda_a(\vec{r})\left(\frac{1}{2}\sigma_a\right) = I - \mathrm{i}q\mathbf{T}$$

Alors,

$$\Omega\vec{\mathbf{A}}\Omega^{-1} \simeq \vec{\mathbf{A}} - \mathrm{i}q[\mathbf{T},\vec{\mathbf{A}}]$$

et

$$(\vec{\nabla}\Omega)\Omega^{-1} \simeq -\mathrm{i}q\sum_a \vec{\nabla}\Lambda_a\left(\frac{1}{2}\sigma_a\right)$$

Les relations de commutation (3.52) donnent

$$[\mathbf{T},\vec{\mathbf{A}}] = \left[\sum_b \Lambda_b\left(\frac{1}{2}\sigma_b\right), \sum_c \vec{A}_c\left(\frac{1}{2}\sigma_c\right)\right] = \mathrm{i}\sum_{b,c}\varepsilon_{abc}\Lambda_b\vec{A}_c\left(\frac{1}{2}\sigma_a\right)$$

d'où, par identification du coefficient de $\sigma_a/2$

$$\delta\vec{A}_a = \vec{A}'_a - \vec{A}_a = -\vec{\nabla}\Lambda_a + q\sum_{b,c}\varepsilon_{abc}\Lambda_b\vec{A}_c$$

**3.** Nous avons établi la forme de la dérivée covariante en exigeant $\vec{\jmath}' = \vec{\jmath}$, et par construction

$$\Omega\vec{\mathbf{D}}\Omega^{-1} = \vec{\mathbf{D}}'$$

On peut écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps ($\hbar = m = 1$)

$$\frac{1}{2}\left(-\mathrm{i}\vec{\mathbf{D}}\right)^2\Phi = E\Phi \qquad \Phi = \Omega^{-1}\Phi'$$

sous la forme

$$\frac{1}{2}\Omega^{-1}\Omega\left(-\mathrm{i}\vec{\mathbf{D}}\right)^2\Omega^{-1}\Phi' = E\Omega^{-1}\Phi'$$

En multipliant les deux membres de l'équation par $\Omega$, on obtient

$$\frac{1}{2}\left(-\mathrm{i}\vec{\mathbf{D}}'\right)^2\Phi' = E\Phi'$$

## 20.11 Exercices du chapitre 11

### 11.6.1 Propriétés des opérateurs statistiques

**1.** Prenons un vecteur $|\varphi\rangle$ de la forme

$$|\varphi\rangle = (0, \cdots, a_i, 0, \cdots, 0, a_j, 0, \cdots, 0)$$

On doit avoir $\langle\varphi|\rho|\varphi\rangle \geq 0$, ce qui implique que la sous-matrice $2 \times 2$ $A$

$$A = \begin{pmatrix} \rho_{ii} & \rho_{ij} \\ \rho_{ji} & \rho_{jj} \end{pmatrix}$$

doit être positive. D'autre part $(\rho_{ii}+\rho_{jj})$, qui est la somme des valeurs propres de $A$, vérifie $(\rho_{ii} + \rho_{jj}) \leq 1$. On en déduit que le produit des valeurs propres de $A$ est $\leq 1/4$

$$0 \leq \rho_{ii}\rho_{jj} - |\rho_{ij}|^2 \leq \frac{1}{4}$$

Si $\rho_{ii} = 0$, ceci implique que $\rho_{ij} = 0$.

**2.** La condition d'un test maximal avec 100 % de succès implique qu'il existe un vecteur $|\varphi\rangle$ tel que $\mathrm{Tr}\,\rho\mathcal{P}_\varphi = 1$, avec $\mathcal{P}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$, et donc $\langle\varphi|\rho|\varphi\rangle = 1$. On choisit une base orthonormée où $|\varphi\rangle$ est, par exemple, le premier vecteur de la base, $|\varphi\rangle = |1\rangle$. Dans ces conditions, les éléments diagonaux de $\rho$ vérifient

$$\rho_{11} = 1,\ \rho_{ii} = 0,\ i \neq 1$$

car le test $|i\rangle$, $|i\rangle \neq |1\rangle$ a une probabilité nulle. D'après la question précédente, tous les éléments non diagonaux sont nuls, $\rho_{ij} = 0, i \neq j$ et $\rho = |\varphi\rangle\langle\varphi| = |1\rangle\langle 1|$.

Montrons d'abord l'inégalité pour deux opérateurs statistiques $\rho'$ et $\rho''$

$$\mathrm{Tr}\,(\rho'\rho'') \leq 1$$

Soit

$$\rho' = \sum_i \mathsf{p}_i |i\rangle\langle i| \qquad \rho'' = \sum_\alpha \mathsf{p}_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|$$

les décompositions de $\rho'$ et $\rho''$ sur deux bases orthonormées. Nous avons

$$\mathrm{Tr}\,(\rho'\rho'') = \sum_{n,i,\alpha} \mathsf{p}_i \mathsf{p}_\alpha \langle n|i\rangle\langle i|\alpha\rangle\langle\alpha|n\rangle = \sum_{i,\alpha} \mathsf{p}_i \mathsf{p}_\alpha |\langle i|\alpha\rangle|^2$$

et l'inégalité découle immédiatement de $|\langle i|\alpha\rangle|^2 \leq 1$. Si $\rho' = \rho'' = \rho$, alors $\langle i|\alpha\rangle = \delta_{i\alpha}$ et

$$\mathrm{Tr}\,\rho^2 = \sum_i \mathsf{p}_i^2$$

**3.** La condition nécessaire et suffisante pour que $\mathrm{Tr}\,\rho^2 = 1$ est qu'un seul des $\mathsf{p}_i$ soit non nul, et donc égal à un : $\rho$ représente alors le cas pur $|i\rangle$. Si

$$\rho = \lambda\rho' + (1-\lambda)\rho''$$

alors

$$\mathrm{Tr}\,\rho^2 = \lambda^2 \mathrm{Tr}\,(\rho')^2 + (1-\lambda)^2 \mathrm{Tr}\,(\rho'')^2 + 2\lambda(1-\lambda)\mathrm{Tr}\,(\rho'\rho'')$$

On ne peut avoir $\mathrm{Tr}\,\rho^2 = 1$ que si $\mathrm{Tr}\,(\rho'\rho'') = 1$, et donc $\rho' = \rho'' = 1$.

**4.** On a manifestement $\rho_{ij} = \rho^*_{ji}$ et

$$\mathrm{Tr}\,\rho = \sum_i \rho_{ii} = \sum_{i,m} |c_{im}|^2 = 1$$

d'après (11.6). La positivité se montre en remarquant que, si $|\varphi\rangle = \sum_i \lambda_i |i\rangle$

$$\langle\varphi|\rho|\varphi\rangle = \sum_{i,j} \lambda_i^* \rho_{ij} \lambda_i = \sum_{i,j,m} \lambda_i^* c_{im} c^*_{jm} \lambda_i = \sum_m \Big|\sum_i \lambda_i^* c_{im}\Big|^2 \geq 0$$

### 11.6.2 Structure fine et effet Zeeman du positronium

**1.** La masse réduite est la moitié de celle de l'électron et les niveaux d'énergie se déduisent de (1.36)

$$E_n = -\frac{R_\infty}{2n^2}$$

**2.** Écrivons explicitement l'action de $\sigma_x$ et $\sigma_y$ sur les vecteurs $|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle$

$$\begin{aligned}
\sigma_{1x}\sigma_{2x}|++\rangle &= |--\rangle \qquad & \sigma_{1y}\sigma_{2y}|++\rangle &= -|--\rangle \\
\sigma_{1x}\sigma_{2x}|+-\rangle &= |-+\rangle \qquad & \sigma_{1y}\sigma_{2y}|+-\rangle &= |-+\rangle \\
\sigma_{1x}\sigma_{2x}|-+\rangle &= |+-\rangle \qquad & \sigma_{1y}\sigma_{2y}|-+\rangle &= |+-\rangle \\
\sigma_{1x}\sigma_{2x}|--\rangle &= |++\rangle \qquad & \sigma_{1y}\sigma_{2y}|--\rangle &= -|++\rangle
\end{aligned}$$

et $\sigma_{1z}\sigma_{2z}|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle = \varepsilon_1\varepsilon_2|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle$, d'où l'action de $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$

$$\begin{aligned}
\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2|++\rangle &= |++\rangle \\
\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2|+-\rangle &= 2|-+\rangle - |+-\rangle \\
\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2|-+\rangle &= 2|+-\rangle - |-+\rangle \\
\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2|--\rangle &= |--\rangle
\end{aligned}$$

Les états $|I\rangle$, $|II\rangle$ et $|III\rangle$ sont des états de spin 1, et $|IV\rangle$ un état de spin 0. On trouve plus simplement l'action de $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ en utilisant la composition de deux spins 1/2 (§ 9.6.1).

**3.** Les résultats de la question précédente impliquent

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2|I\rangle = |I\rangle \qquad \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2|III\rangle = |III\rangle$$

ainsi que

$$\begin{aligned}
\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2|II\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) = |II\rangle \\
\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2|IV\rangle &= -3\,\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) = -3|IV\rangle
\end{aligned}$$

**4.** Dans la base $\{|I\rangle, |II\rangle, |III\rangle, |IV\rangle\}$, les projecteurs $\mathcal{P}_1$ et $\mathcal{P}_{-3}$ ainsi que $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ sont diagonaux

$$\mathcal{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathcal{P}_{-3} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

Si $\mathcal{P}_1 = \lambda I + \mu \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$, on doit avoir

$$\lambda + \mu = 1 \quad \text{et} \quad \lambda - 3\mu = 0$$

soit $\lambda = 3/4$ et $\mu = 1/4$. On déduit $\mathcal{P}_3 = I - \mathcal{P}_1$

$$\mathcal{P}_1 = \frac{1}{4}\,(3I + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \qquad \mathcal{P}_{-3} = \frac{1}{4}\,(I - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$$

**5.** On a immédiatement $\mathcal{P}_{12}|++\rangle = |++\rangle$ et $\mathcal{P}_{12}|--\rangle = |--\rangle$, tandis que

$$\mathcal{P}_{12}|+-\rangle = \frac{1}{2}(|+-\rangle + 2|-+\rangle - |+-\rangle) = |-+\rangle$$

et en général $\mathcal{P}_{12}|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle = |\varepsilon_2\varepsilon_1\rangle$.

**6.** On connaît les valeurs propres et les vecteurs propres de $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$, et donc ceux de $H$

– $|I\rangle$, $|II\rangle$, $|III\rangle$ sont vecteurs propres de $H$ avec la valeur propre $E_0 + A$
– $|IV\rangle$ est vecteur propre de $H$ avec la valeurs propre $E_0 - 3A$

**7.** Le facteur gyromagnétique du positron est l'opposé de celui de l'électron : $\gamma_{e^+} = -\gamma_{e^-} = -q_e/m$. Le hamiltonien total s'écrit

$$H = H_0 - (\vec{\mu}_{e^-} + \vec{\mu}_{e^+}) \cdot \vec{B} = H_0 - \frac{q_e \hbar}{2m}(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})$$

Examinons l'action de l'opérateur $(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})$ sur les vecteurs de base de $H_0$

$$(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})|++\rangle = 0 \qquad (\sigma_{1z} - \sigma_{2z})|--\rangle = 0$$

$$(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})|II\rangle = 2|IV\rangle$$

et

$$\langle II|H_1|IV\rangle = \langle IV|H_1|II\rangle = 2\left(-\frac{q_e\hbar}{2m}\right) = 2Ax$$

La forme matricielle de $H$ est, dans la base $\{|I\rangle, |II\rangle, |III\rangle, |IV\rangle\}$

$$H = \begin{pmatrix} E_0 + A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_0 + A & 0 & 2Ax \\ 0 & 0 & E_0 + A & 0 \\ 0 & 2Ax & 0 & E_0 - 3A \end{pmatrix}$$

Il y a donc deux vecteurs propres évidents $|I\rangle$ et $|III\rangle$ avec les valeurs propres $E_0 + A$. Les deux autres valeurs propres sont obtenues en diagonalisant la matrice $2 \times 2$

$$H' = E_0 I + A \begin{pmatrix} 1 & 2x \\ 2x & -3 \end{pmatrix} = E_0 I + AM$$

L'équation aux valeurs propres de $M$ est

$$\lambda^2 + 2\lambda - (3 + 4x^2) = 0$$

ce qui donne les valeurs de l'énergie

$$E_\pm = E_0 - A \pm 2A\sqrt{1 + x^2}$$

Pour $x = 0$, on retrouve les valeurs $E_0 + A$ et $E_0 - 3A$, tandis que pour $|x| \to \infty$, les vecteurs propres tendent vers ceux de $(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})$ avec les valeurs propres $\pm 2Ax$.

### 11.6.3 Ondes de spin et magnons

**1.** Comme les valeurs propres de $(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1})$ sont comprises entre $-3$ et $+1$

$$E \geq \frac{1}{2}NA - \frac{1}{2}NA = 0$$

Si le vecteur d'état est tel que $(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1}) = 1$, on obtient le fondamental $E_0 = 0$. Ce vecteur d'état est

$$\Phi_0 = |\,+++\cdots++\rangle$$

car

$$(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1})|\Phi_0\rangle = |\Phi_0\rangle$$

**2.** L'opérateur $\mathcal{P}_{n,n+1}$ échange les spins $n$ et $n+1$ : nous avons vu dans la question **5** de l'exercice précédent que pour deux spins

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{12}|\,++\rangle &= |\,++\rangle \qquad \mathcal{P}_{12}|\,--\rangle = |\,--\rangle \\ \mathcal{P}_{12}|\,+-\rangle &= |\,-+\rangle \qquad \mathcal{P}_{12}|\,-+\rangle = |\,+-\rangle \end{aligned}$$

et le nombre de spins up moins le nombre de spins down est inchangé. Les vecteurs propres de $H$ sont donc des vecteurs où le nombre de spins up moins le nombre de spins down est une constante. En particulier pour l'état $|\Psi_n\rangle$, cette constante est $N-1$. L'opérateur $I - \mathcal{P}_{n,n+1}$ appliqué à $|\Psi_n\rangle$ donne zéro sur toute paire de spins up, et seules les paires $(n-1,n)$ et $(n,n+1)$ vont donner un résultat non nul. Comme $\mathcal{P}_{n-1,n}$, par exemple, échange les spins $n-1$ et $n$

$$\mathcal{P}_{n-1,n}|\,++++-+++\rangle = |\,+++-++++\rangle$$

soit

$$\mathcal{P}_{n-1,n}|\Psi_n\rangle = |\Psi_{n-1}\rangle \qquad \mathcal{P}_{n-1,n}|\Psi_{n-1}\rangle = |\Psi_n\rangle$$

on obtient

$$\begin{aligned} (I - \mathcal{P}_{n-1,n})|\Psi_n\rangle &= |\Psi_n\rangle - |\Psi_{n-1}\rangle \\ (I - \mathcal{P}_{n,n+1})|\Psi_n\rangle &= |\Psi_n\rangle - |\Psi_{n+1}\rangle \end{aligned}$$

Ceci donne l'action de $H$ sur $|\Psi_n\rangle$

$$H|\Psi_n\rangle = -A\Big(|\Psi_{n-1}\rangle + |\Psi_{n+1}\rangle - 2|\Psi_n\rangle\Big)$$

**3.** Examinons l'action de $H$ sur $|k_s\rangle$

$$H|k_s\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s nl} H|\Psi_n\rangle = -A\sum_{n=0}^{N-1} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s nl}\Big(|\Psi_{n-1}\rangle + |\Psi_{n+1}\rangle - 2|\Psi_n\rangle\Big)$$

mais

$$\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s nl}|\Psi_{n-1}\rangle = \sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s (n-1)l}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s l}|\Psi_{n-1}\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s l}\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s nl}|\Psi_n\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s l}|k_s\rangle$$

On a donc

$$H|k_s\rangle = 2A(1 - \cos k_s l)|k_s\rangle$$

Les fréquences propres sont

$$\omega_k = 2A(1-\cos k_s l) \qquad |k_s| \to 0 \;\; \omega_k \simeq (Al^2)k_s^2$$

Il est également intéressant d'adapter la méthode du § 5.1.2 en remarquant que $H$ peut s'écrire sous la forme

$$H = -A\left(U_P + U_P^{-1} - 2\right)$$

où $U_P$ effectue une permutation circulaire des spins $n \to n+1$ et chercher les vecteurs propres $|\Psi_s\rangle$ de $U_P$. Écrivant

$$|\Psi_s\rangle = \sum_n c_n^s |\Psi_n\rangle \qquad U_P|\Psi_s\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_s}|\Psi_s\rangle$$

avec

$$\delta_s = \frac{2\pi s}{N} = k_s l$$

On doit avoir

$$c_{n+1} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_s} c_n$$

### 11.6.4 Écho de spin et décomposition des niveaux en RMN

**1.** Le calcul de $\tilde{a}(\omega)$ donne

$$\tilde{a}(\omega) = \frac{2}{1/T_2 - \mathrm{i}\delta}$$

En utilisant (3.59) et $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + \mathrm{i}\sum_k \varepsilon_{ijk}\sigma_k$, on montre

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\sigma_z}\,\sigma_y\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\sigma_z} = (I\cos\alpha - \mathrm{i}\sigma_z\sin\alpha)\sigma_y(I\cos\alpha - \mathrm{i}\sigma_z\sin\alpha) = \sigma_y$$

ce qui donne

$$U(t) = -\mathrm{i}\sigma_y$$

Partant de

$$\rho(t=0) = \frac{1}{2}\left(I + \frac{1}{2}\,\delta\mathsf{p}\,\sigma_y\right)$$

on obtient en l'absence de relaxation

$$U(t)\left[\frac{1}{2}\left(I + \frac{1}{2}\,\delta\mathsf{p}\,\sigma_y\right)\right]U^\dagger(t) = \frac{1}{2}\left(I + \frac{1}{2}\,\delta\mathsf{p}\,\sigma_y\right)$$

En présence de relaxation,

$$\delta\mathsf{p} = \delta\mathsf{p}(t=0)\mathrm{e}^{-t/T_2}$$

puisque $T_2$ est le temps de relaxation transverse, et donc

$$U(t)\rho(t=0)U^\dagger(t) = \frac{1}{2}\left(I + \frac{1}{2}\,\delta\mathsf{p}\,\sigma_y\,\mathrm{e}^{-t/T_2}\right)$$

indépendamment de $\delta$. L'opération de rotation du spin d'un angle $\pi$ permet de réaligner les spins dans une même direction : dans l'intervalle $[0, t/2]$, les spins s'alignent de façon aléatoire, car chaque spin voit un désaccord $\delta$ différent, mais après renversement des spins, l'évolution dans l'intervalle $[t/2, t]$ réaligne tous les spins dans une même direction.

**2.** Par définition du produit tensoriel de deux opérateurs

$$(A\otimes B)|\varphi\otimes\psi\rangle = |A\varphi\otimes B\psi\rangle$$

d'où l'on déduit

$$(A\otimes B)^2 = A^2\otimes B^2$$

et

$$\left(\sigma_z^{(1)}\otimes\sigma_z^{(2)}\right)^2 = I$$

Ceci donne l'expression de $U_{12}(t)$ en développant l'exponentielle. L'opérateur de rotation de $\pi$ est

$$U[\mathcal{R}_x^{(1)}(\pi)] = -\mathrm{i}\sigma_x$$

Afin de simplifier les notations, posons $\sigma_x^{(i)} = X_i$, $\sigma_y^{(i)} = Y_i$ et $\sigma_z^{(i)} = Z_i$, d'où

$$U_{12}(t)(X_1)U_{12}(t) = [X_1\cos\omega_{12}t + (Y_1\otimes Z_2)\sin\omega_{12}t]\,U_{12}(t) = X_1$$

Comme le temps caractéristique de l'évolution due au couplage des spins est très grand par rapport à la durée d'une rotation de Rabi, on peut négliger cette évolution propre pendant la durée de la rotation, qui est essentiellement instantanée à l'échelle de l'évolution libre.

**3.** Les valeurs propres de $\sigma_z^{(1)}\otimes\sigma_z^{(2)}$ sont $+1$ et $-1$. En l'absence de champ de radiofréquences, on aura donc 4 niveaux d'énergie

$$\hbar(\delta^{(1)}+\delta^{(2)}+\omega_{12}), \qquad \hbar(\delta^{(1)}-\delta^{(2)}-\omega_{12}),$$
$$\hbar(-\delta^{(1)}+\delta^{(2)}+\omega_{12}), \qquad \hbar(-\delta^{(1)}-\delta^{(2)}+\omega_{12})$$

Ces niveaux sont représentés sur la figure 5.10, avec les 4 transitions permises, qui ont donc pour fréquences

$$2|\delta^{(1)}\pm\omega_{12}| \qquad 2|\delta^{(2)}\pm\omega_{12}|$$

## 11.6.6 Inégalité de Wigner

La variable $\sigma_1\tau_2$ par exemple n'est pas admissible car elle est non locale. Une distribution de probabilité ne contredisant pas la localité est

$$\mathsf{p}(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3;\tau_1,\tau_2,\tau_3)$$

On trouve pour $\mathsf{p}_{23}$ et $\mathsf{p}_{12}$

$$\begin{aligned}\mathsf{p}_{23} &= \mathsf{p}(++-;--+) + \mathsf{p}(-+-;+-+)\\ \mathsf{p}_{12} &= \mathsf{p}(+-+;-+-) + \mathsf{p}(+--;-++)\end{aligned}$$

Les probabilités étant positives, on déduit de ces équations

$$\mathsf{p}_{12} + \mathsf{p}_{23} \geq \mathsf{p}_{13}$$

C'est l'inégalité de Wigner, un exemple d'inégalité de Bell. Elle n'est compatible avec le résultat (11.48) de la mécanique quantique que si

$$\sin^2\frac{\theta_{12}}{2} + \sin^2\frac{\theta_{23}}{2} \geq \sin^2\frac{\theta_{13}}{2}$$

Choisissant $\theta_2 = 0$, $\theta_1 = -\theta_3 = \theta$, cette équation devient

$$\cos^2\frac{\theta}{2} \leq \frac{1}{2} \qquad \text{soit} \qquad \pi/2 \leq \theta \leq \pi$$

Il existe donc un intervalle $]0, \pi/2[$ en $\theta$ où la mécanique quantique est incompatible avec la contrafactualité.

## 11.6.7 États de Hardy

Les trois configurations ayant une probabilité nulle sont données par

$$\mathsf{p}(\alpha_-, B_-) = \mathsf{p}(\alpha_+, \beta_+) = \mathsf{p}(A_-, \beta_-) = 0$$

En effet, les amplitudes de probabilité suivantes sont nulles

$$\langle \alpha_- B_- | \Phi_H \rangle = \langle \alpha_+ \beta_+ | \Phi_H \rangle = \langle A_- \beta_- | \Phi_H \rangle = 0$$

Les probabilités non nulles sont

$$\begin{array}{lllll}\mathsf{p}(A_+, \alpha_+, B_-, \beta_-) & ; & \mathsf{p}(A_+, \alpha_+, B_-, \beta_+) & ; & \mathsf{p}(A_+, \alpha_+, B_+, \beta_-)\\ \mathsf{p}(A_+, \alpha_-, B_+, \beta_-) & ; & \mathsf{p}(A_+, \alpha_-, B_+, \beta_+) & ; & \mathsf{p}(A_-, \alpha_-, B_+, \beta_+)\end{array}$$

On en déduit

$$\mathsf{p}(A_+ | B_-) = 1, \quad \text{ce qui contredit} \quad \mathsf{p}(A_- | B_-) \neq 0$$

Il n'existe aucune distribution de probabilité jointe qui permette de calculer les valeurs moyennes, par exemple on ne peut *pas* calculer $\langle A\beta \rangle$ comme une moyenne d'ensemble

$$\langle A\beta \rangle = \sum_{A_\pm, \cdots, \beta_\pm} A_\pm \beta_\pm \ \mathsf{p}(A_\pm, \alpha_\pm, B_\pm, \beta_\pm)$$

### 11.6.8 Photons intriqués en polarisation

**1.** Évaluons le vecteur $|\theta\theta_\perp\rangle$

$$\begin{aligned} |\theta\theta_\perp\rangle &= \big(\cos\theta|x\rangle + \sin\theta|y\rangle\big)\big(-\sin\theta|x\rangle + \cos\theta|y\rangle\big) \\ &= -\sin\theta\cos\theta|xx\rangle + \cos^2\theta|xy\rangle - \sin^2\theta|yx\rangle + \sin\theta\cos\theta|yy\rangle \end{aligned}$$

Pour obtenir $|\theta_\perp\theta\rangle$, il suffit d'échanger $x \leftrightarrow y$

$$|\theta_\perp\theta\rangle = -\sin\theta\cos\theta|xx\rangle + \cos^2\theta|yx\rangle - \sin^2\theta|xy\rangle + \sin\theta\cos\theta|yy\rangle$$

et on obtient en soustrayant la seconde équation de la première

$$|\theta\theta_\perp\rangle - |\theta_\perp\theta\rangle = |xy\rangle - |yx\rangle$$

**2.** Pour le photon 1

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(-|D\rangle + |G\rangle\big) \qquad |y\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\big(|D\rangle + |G\rangle\big)$$

et pour le photon 2, il faut changer $|y\rangle$ en $-|y\rangle$

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(-|D\rangle + |G\rangle\big) \qquad |y\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\big(|D\rangle + |G\rangle\big)$$

et on trouve pour des photons ayant une direction de propagation opposée

$$|\Phi\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\big(|DD\rangle - |GG\rangle\big)$$

Remarque : si les deux photons ont la même direction de propagation, comme c'est le cas des paires obtenues par conversion paramétrique, alors

$$|\Phi\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\big(|DG\rangle - |GD\rangle\big)$$

Dans les deux cas, on vérifie que la composante $Oz$ du moment angulaire est nulle : $(\Sigma_{1z} + \Sigma_{2z})|\Phi\rangle = 0$, où $\Sigma_z$ est donné par (3.26).

**3.** On trouve

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\theta\theta\rangle + |\theta_\perp\theta_\perp\rangle\big) = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|DD\rangle + |GG\rangle\big)$$

L'application de $\Sigma_z$ montre à nouveau que cet état est de moment angulaire zéro.

### 11.6.11 États GHZ

**1.** Examinons par exemple l'action de $\Sigma_a$ sur $|\Psi\rangle$. Compte tenu de

$$\sigma_x|+\rangle = |-\rangle \qquad \sigma_x|-\rangle = |+\rangle \qquad \sigma_y|+\rangle = \mathrm{i}|-\rangle \qquad \sigma_y|-\rangle = -\mathrm{i}|-\rangle$$

nous avons

$$\Sigma_a|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(\mathrm{i})^2|---\rangle - (-\mathrm{i})^2|+++\rangle\right] = |\Psi\rangle$$

Comme $|\Psi\rangle$ est vecteur propre de $\Sigma_a$avec la valeur propre $+1$, le produit $A_xB_yC_y$ du résultat des mesures de $\sigma_{xa}$, $\sigma_{yb}$ et $\sigma_{yc}$ sera $A_xB_yC_y = 1$.

**2.** Nous avons cette fois

$$\Sigma|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|---\rangle - |+++\rangle\right] = -|\Psi\rangle$$

et donc $A_xB_xC_x = -1$. Or, compte tenu de $A_y^2 = B_y^2 = C_y^2 = 1$

$$A_xB_xC_x = (A_xB_yC_y)(A_yB_xC_y)(A_yB_yC_x) = +1$$

et il y a donc contradiction avec la localité : après avoir interagi initialement, les spins ne peuvent pas transporter l'information sur les valeurs de $A_x \cdots C_y$.

### 11.6.13 Discrimination entre deux états non orthogonaux

**1.** Étant donné que

$$\sin^2\theta + \cos 2\theta = \cos^2\theta$$

la norme du vecteur $\cos\theta|0_A \otimes 1_B\rangle$ est inchangée. Nous avons

$$\begin{aligned} |\Phi_\pm\rangle &\rightarrow \pm\sin\theta|1_A \otimes 0_B\rangle + \sin\theta|0_A \otimes 0_B\rangle \\ &= \sqrt{2}\sin\theta\,|\pm_A \otimes 0_B\rangle + \cos^{1/2}2\theta|1_A \otimes 1_B\rangle \end{aligned}$$

**2.** L'état $|0_B\rangle$ est corrélé à deux états *orthogonaux* de $A$, $|+_A\rangle$ et $|-_A\rangle$, et ces états peuvent être distingués sans ambiguïté dans une mesure. L'état $|1_A\rangle$ est corrélé à $|1_B\rangle$ quel que soit l'état $|\psi_A\rangle$. On peut donc effectuer la distinction avec une probablité

$$2\sin^2\theta = 1 - \cos 2\theta = 1 - \langle\psi_-|\psi_+\rangle$$

Noter en effet que

$$2\sin^2\theta + \cos 2\theta = 1$$

**3.** Si $\sqrt{t}\cos\theta = \sin\theta$, c'est-à-dire si $t = \tan^2\theta$, alors le résultat final de l'ensemble des transformations est

$$\cos\theta\,|0\rangle \pm \sin\theta\,|1\rangle \to \sqrt{2}\,\sin\theta\,|\pm\otimes y\rangle + \cos^{1/2}\theta\,|0\otimes y'\rangle$$

À l'aide du modulateur électro-optique, on fait tourner la polarisation de $\pi/4$, ce qui permet au au prisme polarisant $PP_3$ de distinguer les états $|\pm\rangle$, et donc les états $\psi_\pm$ avec une probabilité $2\sin^2\theta$.

## 11.6.14 Interférences des temps d'émission

**1.** Comme la longueur de cohérence des photons convertis est petite par rapport à la différence de marche entre les deux bras, on ne peut certainement pas observer d'interférences dans un interféromètre individuel. Mais il existe une raison plus fondamentale, qui sera expliquée à la fin de la question suivante.
**2.** On peut écrire quatre amplitudes de probabilité différentes pour la détection jointe des photons en $D_1$ et $D_2$

$$\begin{aligned} A &= a^1_C a^2_C \qquad & B = a^1_C a^2_L \\ A' &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\,a^1_L a^2_L \qquad & B' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\,a^1_L a^2_C \end{aligned}$$

L'amplitude $a^i_C$ correspond au trajet du photon *(i)* passant par le bras court de l'interféromètre, $a^i_L$ au trajet passant par le bras long. La mesure du temps d'arrivée des photons permet de distinguer les trajets $(CL)$ et$(LC)$ ; même si le temps d'émission de la paire est inconnu, le photon passant par le bras long arrive plus tard que celui passant par le bras court. Par exemple, dans le cas $(CL)$, le photon 1 arrive en $D_1$ 0.7 ns avant le second photon en $D_2$, ce qui est très largement supérieur au temps de résolution de 0.1 ns des détecteurs. En revanche, le dispositif expérimental ne permet pas de distinguer, même en principe, les trajets $(CC)$ et $(LL)$. Il faut donc ajouter les *amplitudes* de ces trajets pour obtenir la probabilité de détection en coïncidence

$$\mathsf{p}(D_1, D_2) = |A + A'|^2 = |a^1_C a^2_C + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\,a^1_L a^2_L|^2$$

ce qui montre à l'évidence une dépendance par rapport à $\delta$.

Dans l'expérience de l'énoncé, la fenêtre de coïncidence est inférieure aux différences de temps de parcours, ce qui permet de distinguer les trajets $(LC)$ et $(CL)$ des trajets $(LL)$ et $(CC)$. Mais cette condition n'est pas essentielle pour observer les interférences ; si elle n'était pas réalisée, on ajouterait simplement un bruit de fond

$$\mathsf{p}(D_1, D_2) = |B|^2 + |B'|^2 + |A + A'|^2$$

correspondant aux deux premiers termes sans interférences de l'équation précédente. Une autre observation importante est que si l'on supprime les miroirs

semi-transparents de l'interféromètre de gauche, on conserve une information sur les temps de parcours : si le photon de gauche arrive avant celui de droite, on sait que le photon de droite a emprunté le bras long. Il n'y a donc pas de dépendance par rapport à $\delta$ et pas d'interférences. L'information disponible sur le chemin suivi par le photon dans l'interféromètre de droite efface toute possibilité d'interférences, même lorsque la longueur de cohérence est plus petite que $\Delta l$. En fait, il n'est même pas nécessaire que le détecteur $D_2$ soit présent ! Il suffit que l'information sur les temps d'arrivée soit disponible en principe, et comme nous l'avons souvent souligné, il n'est pas nécessaire que l'observation des temps d'arrivée soit effectivement réalisée ! Tant que l'information sur les temps d'arrivée est disponible en principe, et elle l'est en raison de la seule présence de l'état intriqué, en aucun cas on ne peut avoir d'interférences dans un seul des deux interféromètres.

### 11.6.15 Calcul quantique avec des ions piégés

**1.** Nous écrivons le hamiltonien d'interaction en terme de $\sigma_+$ et $\sigma_-$

$$H_{\rm int} = -\frac{1}{2}\,\hbar\omega_1[\sigma_+ + \sigma_-]\left[{\rm e}^{{\rm i}(\omega t - kz - \phi)} + {\rm e}^{-{\rm i}(\omega t - kz - \phi)}\right]$$

et nous passons dans le point de vue de l'interaction en utilisant (5.32)

$${\rm e}^{{\rm i}H_0 t/\hbar}\,\sigma_\pm\,{\rm e}^{-{\rm i}H_0 t/\hbar} = {\rm e}^{\mp{\rm i}\omega_0 t}\,\sigma_\pm$$

A l'approximation séculaire, nous pouvons négliger les termes qui se comportent comme $\exp[\pm{\rm i}(\omega_0 + \omega)t]$ et il reste

$$\tilde{H}_{\rm int} \simeq -\frac{\hbar}{2}\,\omega_1\left[\sigma_+\,{\rm e}^{{\rm i}(\delta t - \phi)}\,{\rm e}^{-{\rm i}k\tilde{z}} + \sigma_-\,{\rm e}^{-{\rm i}(\delta t - \phi)}\,{\rm e}^{{\rm i}k\tilde{z}}\right]$$

**2.** $\Delta z = \sqrt{\hbar/(2M\omega_z)}$ est l'étalement de la fonction d'onde dans le puits harmonique. Par conséquent, $\eta = k\Delta z$ est le rapport de cet étalement à la longueur d'onde de la lumière laser. Nous pouvons écrire

$$k\tilde{z} = k\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_z}}\,(\tilde{a} + \tilde{a}^\dagger) = \eta\left(a\,{\rm e}^{-{\rm i}\omega_z t} + a^\dagger\,{\rm e}^{{\rm i}\omega_z t}\right)$$

L'élément de matrice de $\tilde{H}_{\rm int}$ entre les états $|1, m + m'\rangle$ et $|0, m\rangle$ est

$$\langle 1, m + m'|\tilde{H}_{\rm int}|m\rangle = -\frac{1}{2}\,\hbar\omega_1 {\rm e}^{{\rm i}(\delta t - \phi)}\,\langle m + m'|{\rm e}^{-{\rm i}\eta(\tilde{a} + \tilde{a}^\dagger)}|m\rangle$$

La fréquence de Rabi pour les oscillations entre les deux niveaux est

$$\omega_1^{m \to m + m'} = \omega_1|\langle m + m'|{\rm e}^{-{\rm i}\eta(a + a^\dagger)}|m\rangle|$$

**3.** Écrivant

$$\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\eta(\tilde{a}+\tilde{a}^\dagger)} \simeq I \pm \mathrm{i}\eta(\tilde{a}+\tilde{a}^\dagger)$$

et en conservant uniquement les termes du premier ordre en $\eta$, nous obtenons

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{\mathrm{int}} &= \frac{\mathrm{i}}{2}\eta\hbar\omega_1\Big[\sigma_+\, a\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta-\omega_z)t}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} - \sigma_-\, a^\dagger \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\delta-\omega_z)t}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \\ &+ \sigma_+\, a^\dagger \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta+\omega_z)t}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} - \sigma_-\, a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\delta+\omega_z)t}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\Big]\end{aligned}$$

La première ligne de $\tilde{H}_{\mathrm{int}}$ correspond à une résonance à $\delta = \omega - \omega_0 = \omega_z$, c'est-à-dire, $\omega = \omega_0 + \omega_z$, une bande latérale bleue, et la seconde ligne à une résonance à $\omega = \omega_0 - \omega_z$, une bande latérale rouge. Le terme en $\sigma_+ a$ de la bande latérale rouge induit des transitions de $|0, m+1\rangle$ vers $|1, m\rangle$, et le terme $\sigma_- a^\dagger$ des transitions de $|1, m\rangle$ vers $|0, m+1\rangle$. De plus,

$$\langle m|a|m+1\rangle = \langle m+1|a^\dagger|m\rangle = \sqrt{m+1}$$

de sorte que nous obtenons l'expression de l'énoncé pour $\tilde{H}^+_{\mathrm{int}}$, avec

$$a_b = \frac{a}{\sqrt{m+1}} \qquad a_b^\dagger = \frac{a^\dagger}{\sqrt{m+1}}$$

La fréquence de Rabi est donc $\omega_1\sqrt{m+1}$. Le même raisonnement s'applique à la bande latérale rouge. Le schéma des niveaux est donné sur la figure 20.1.

**4.** Les opérateurs de rotation $R(\theta, \phi)$ sont donnés par

$$\begin{aligned}R(\theta, \phi = 0) &= I\cos\frac{\theta}{2} - \mathrm{i}\sigma_x \sin\frac{\theta}{2} \\ R\left(\theta, \phi = \frac{\pi}{2}\right) &= I\cos\frac{\theta}{2} - \mathrm{i}\sigma_y \sin\frac{\theta}{2}\end{aligned}$$

de sorte que

$$R(\pi, 0) = -\mathrm{i}\sigma_x \qquad R\Big(\pi, \frac{\pi}{2}\Big) = -\mathrm{i}\sigma_y$$

Nous avons, par exemple,

$$\begin{aligned}R\Big(\pi, \frac{\pi}{2}\Big)R(\beta, 0)R\Big(\pi, \frac{\pi}{2}\Big) &= (-\mathrm{i}\sigma_y)(I\cos\frac{\beta}{2} + \mathrm{i}\sigma_x\sin\frac{\beta}{2})(-\mathrm{i}\sigma_y) \\ &= -(I\cos\frac{\beta}{2} + \mathrm{i}\sigma_x\sin\frac{\beta}{2}) = -R(-\beta, 0)\end{aligned}$$

Appelons $A$ la transition $|0, 0\rangle \leftrightarrow |1, 1\rangle$ et $B$ la transition $|0, 1\rangle \leftrightarrow |1, 2\rangle$. Les fréquences de Rabi sont liées par $\omega_B = \sqrt{2}\,\omega_A$. Par conséquent, si l'angle de rotation est $\theta_A$ pour la transition $A$, cet angle sera $\theta_B = \sqrt{2}\,\theta_A$ pour la transition $B$. Pour la transition $A$, nous choisissons $\alpha = \pi/\sqrt{2}$ et $\beta = \pi$

$$R\Big(\frac{\pi}{\sqrt{2}}, \frac{\pi}{2}\Big)R(\pi, 0)R\Big(\frac{\pi}{\sqrt{2}}, \frac{\pi}{2}\Big)R(\pi, 0) = -I$$

Pour la transition $B$, nous aurons alors $\alpha = \pi$ et $\beta = \pi\sqrt{2}$

$$R\Big(\pi, \frac{\pi}{2}\Big) R(\pi\sqrt{2}, 0) R\Big(\pi, \frac{\pi}{2}\Big) R(\pi\sqrt{2}, 0) = -I$$

L'état $|1,0\rangle$ n'est pas affecté parce que la transition $|0,0\rangle \leftrightarrow |1,0\rangle$ ne résonne pas à la fréquence de la bande latérale bleue. Nous avons donc

$$|00\rangle \leftrightarrow -|0,0\rangle \quad |0,1\rangle \leftrightarrow -|0,1\rangle \quad |1,0\rangle \leftrightarrow +|1,0\rangle \quad |1,1\rangle \leftrightarrow -|1,1\rangle$$

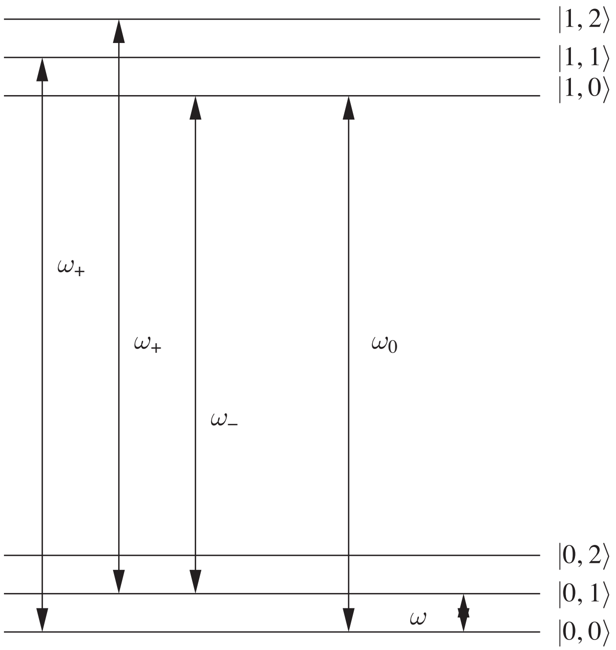



FIG. 20.1 – Schéma des niveaux. Les transitions utilisées sont $(0,0) \leftrightarrow (0,1)$ et $(0,1) \leftrightarrow (1,2)$ : bande décalée vers le bleu, $\omega_+ = \omega_0 + \omega_z$ et $(0,1) \leftrightarrow (1,1)$ : bande décalée vers le rouge, $\omega_- = \omega_0 - \omega_z$.

**5.** $R\Big(\pm\pi, \pi/2\Big) = \mp \mathrm{i}\sigma_y$ de sorte que

$$R\Big(\pm\pi, \frac{\pi}{2}\Big)|0,1\rangle = \mp|1,0\rangle \qquad R\Big(\pm\pi, \frac{\pi}{2}\Big)|1,0\rangle = \pm|0,1\rangle$$

Partons de l'état à deux ions le plus général, les deux ions étant dans l'état fondamental de vibration

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= (a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle) \otimes |0\rangle \\ &= a|00,0\rangle + b|01,0\rangle + c|10,0\rangle + d|11,0\rangle \end{aligned}$$

L'action de $R^{-(2)}(-\pi,\pi/2)$ sur l'ion 2 donne

$$|\Psi'\rangle = R^{-(2)}(-\pi,\pi/2)|\Psi\rangle = a|00,0\rangle + b|00,1\rangle + c|10,0\rangle + d|10,1\rangle$$

Nous appliquons ensuite $R^{+(1)}_{\alpha\beta}$ sur l'ion 1

$$|\Psi''\rangle = R^{+(1)}_{\alpha\beta}|\Psi'\rangle = -a|00,0\rangle - b|00,1\rangle + c|10,0\rangle - d|10,1\rangle$$

et finalement $R^{-(2)}(\pi,\pi/2)$ sur l'ion 2

$$\begin{aligned}|\Psi'''\rangle = R^{-(2)}(\pi,\pi/2)|\Psi''\rangle &= -a|00,0\rangle - b|01,0\rangle + c|10,0\rangle - d|11,0\rangle \\ &= (-a|00\rangle - b|01\rangle + c|10\rangle - d|11\rangle)\otimes|0\rangle\end{aligned}$$

Ceci donne précisément l'action d'une porte cZ à un facteur de phase trivial près.

# 20.12 Exercices du chapitre 12

## 12.7.2 Longueur de corrélation et niveau excité

**1.** En introduisant $I = \sum_n |n\rangle\langle n| = \sum_m |m\rangle\langle m|$

$$\begin{aligned}F(x_b,\tau_b;\tau,\tau';x_a,\tau_a) = \sum_{n,m} &\mathrm{e}^{-E_n(\tau_b-\tau)/\hbar}\langle x_b|n\rangle\langle n|X\,\mathrm{e}^{-H(\tau-\tau')/\hbar} \\ &\times X\,\mathrm{e}^{E_m(\tau_a-\tau')/\hbar}|x_a\rangle\end{aligned}$$

Lorsque $\tau_b\to\infty$, seul le terme $n=0$ subsiste, et de même seul le terme $m=0$ subsiste pour $\tau_a\to-\infty$. Comme

$$\langle x_b|0\rangle = \varphi_0(x_b) \qquad \langle 0|x_a\rangle = \varphi_0^*(x_a)$$

on obtient

$$\lim_{\tau_a\to-\infty}\lim_{\tau_b\to+\infty} F = \varphi_0(x_b)\varphi_0^*(x_a)\langle 0|X\,\mathrm{e}^{-H(\tau-\tau')/\hbar}\,X|0\rangle$$

**2.** De

$$F(x_b,\tau_b|x_a,\tau_a\rangle = \langle x_b|\mathrm{e}^{-H(\tau-\tau')/\hbar}\,x_a\rangle$$

on en déduit par la même méthode qu'à la question **1**

$$\langle 0|T(X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau'))|0\rangle = \lim_{\tau_a\to-\infty}\lim_{\tau_b\to+\infty}\frac{F(x_b,\tau_b;\tau,\tau';x_a,\tau_a)}{F(x_b,\tau_b|x_a,\tau_a)}$$

Introduisons la fonctionnelle génératrice

$$\begin{aligned}Z(j) = \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}x(\tau)\exp\Bigg[-\frac{1}{\hbar}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\left(\frac{1}{2}\,m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2\right. \\ \left. +V(x(\tau)) - \hbar j(\tau)x(\tau)\right)\mathrm{d}\tau\Bigg]\end{aligned}$$

Par différentiation fonctionnelle

$$F(x_b,\tau_b;\tau,\tau';x_a,\tau_a)=\frac{1}{Z(j=0)}\frac{\delta^2 Z(j)}{\delta j(\tau)\delta j(\tau')}$$

Introduisons la fonctionelle génératrice

$$\overline{Z}(j)=\int_{x_a}^{x_b}\mathcal{D}x(\tau)\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{1}{2}\,m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2+V(x(\tau))-\hbar j(\tau)x(\tau)\right)\mathrm{d}\tau\right]$$

en prenant la dérivée fonctionnelle, et compte tenu des résultats précédents

$$\langle 0|T(X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau'))|0\rangle=\frac{1}{\overline{Z}(j=0)}\frac{\delta^2\overline{Z}(j)}{\delta j(\tau)\delta j(\tau')}$$

Pour $\tau>\tau'$,

$$\langle 0|T(X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau'))|0\rangle=\langle 0|X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau')|0\rangle=\sum_n|\langle 0|X|n\rangle|^2\,\mathrm{e}^{-E_n(\tau-\tau')/\hbar}$$

et

$$\langle 0|X_{\mathrm{H}}(\tau)|0\rangle=\langle 0|X|0\rangle$$

Le terme $n=0$ disparaît quand on prend la partie connexe, et lorsque $(\tau-\tau')\to\infty$

$$\langle 0|T(X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau'))|0\rangle=\simeq|\langle 0|X|1\rangle|^2\mathrm{e}^{-E_1|\tau-\tau'|/\hbar}$$

Le comportement asymptotique est contrôlé par l'énergie du premier niveau excité.

**3.** Pour obtenir la fonction de partition, on doit poser $x_a=x_b=x$ et intégrer sur $x$. La partie connexe $\langle x(\tau)x(\tau')\rangle_c$ est donnée par la même intégrale de chemin que $\langle 0|T(X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau'))|0\rangle$ et donc

$$\langle x(\tau)x(\tau')\rangle_c\simeq\mathrm{e}^{-E_1|\tau-\tau'|/\hbar}\qquad\qquad \xi=\hbar/E_1$$

### 12.7.4 Propagateur de Feynman et propagateur euclidien

**1.** Soit

$$X(t)=\theta(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+\theta(-t)\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega t}$$

Calculons sa dérivée première

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}X(t)=-\mathrm{i}\omega\left[\theta(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}-\theta(-t)\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega t}\right]$$

et sa dérivée seconde

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}X(t) = -2\mathrm{i}\omega\delta(t) - \omega^2 X(t)$$

soit

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}D_F(t) + \omega^2 D_F = -\mathrm{i}\delta(t)$$

**2.** Les pôles de l'intégrand sont à $k_0 = -\omega + \mathrm{i}\eta$ et à $k_0 = \omega - \mathrm{i}\eta$. Pour $t > 0$ ($t < 0$), on referme le contour par un grand demi-cercle dans le demi-plan supérieur (inférieur) et on encercle donc le pôle à $k_0 = -\omega + \mathrm{i}\eta$ ($k_0 = \omega - \mathrm{i}\eta$). En prenant le résidu du pôle

$$t > 0 \quad : \quad D_F(t) = \frac{1}{2\omega}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \qquad\qquad t < 0 \quad : \quad D_F(t) = \frac{1}{2\omega}\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega t}$$

**3.**

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\mathrm{e}^{-\omega|\tau|} = -\varepsilon(\tau)\omega\mathrm{e}^{-\omega|\tau|}$$

où $\varepsilon(\tau)$ est la fonction signe de $\tau$. On en déduit

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}\mathrm{e}^{-\omega|\tau|} = -2\omega\delta(\tau) + \omega^2\,\mathrm{e}^{-\omega|\tau|}$$

### 12.7.6 Calcul de la fonctionnelle génératrice pour l'oscillateur harmonique

**1.** Vérifions que la fonction de Green $G(\tau)$ est

$$G(\tau) = \theta(\tau)u(\tau)v(0) + \theta(-\tau)v(\tau)u(0)$$

Calculons sa dérivée première

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}G(\tau) = \theta(\tau)\dot{u}(\tau)v(0) + \theta(-\tau)u(0)\dot{v}(\tau)$$

puis sa dérivée seconde

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}G(\tau) = \delta(\tau)[\dot{u}(0)v(0) - u(0)\dot{v}(0)] + \theta(\tau)\ddot{u}(\tau)v(0) + \theta(-\tau)u(0)\ddot{v}(\tau)$$

soit, en utilisant les équations du mouvement pour $u(\tau)$ et $v(\tau)$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}G(\tau) = \delta(\tau)[\dot{u}(0)v(0) - u(0)\dot{v}(0)] + \omega^2 G(\tau)$$

Compte tenu de

$$\dot{u}(0) = -\lambda\omega\cosh(\omega\tau_b) \qquad\qquad \dot{v}(0) = \lambda'\omega\sinh(\omega\tau_a)$$

on obtient pour le coefficient de $\delta(\tau)$

$$\dot{u}(0)v(0) - u(0)\dot{v}(0) = \lambda\lambda'\omega^2 \sinh\omega(\tau_b - \tau_a) = 1$$

**2.** Partons de l'action euclidienne

$$S_E[y] = \int_{\tau_a}^{\tau_b} \left[\frac{1}{2}\,\dot{y}^2 + \frac{1}{2}\,\omega^2 y^2 - jy\right] \mathrm{d}\tau$$

Comme $y(\tau)$ vérifie les équations du mouvement, $\delta S_E/\delta y = 0$ ; de plus, $S_E$ est quadratique en $y$ et par conséquent,

$$S_E(y+h) = S_E(y) + S_E(h)$$

En utilisant

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}(y\dot{y}) = \dot{y}^2 + y\ddot{y} = \dot{y}^2 + y(\omega^2 y - j)$$

on obtient

$$\dot{y}^2 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}(y\dot{y}) - \omega^2 y^2 + jy$$

d'où

$$S_E(y) = \frac{1}{2}\left[y\dot{y}\right]_{\tau_a}^{\tau_b} - \frac{1}{2}\int_{\tau_a}^{\tau_b} jy\mathrm{d}\tau$$

**3.** La fonction $y_0(\tau)$ est une combinaison linéaire de deux solutions $u(\tau)$ et $v(\tau)$. Pour que $y_0(\tau_a) = x_a$ et $y_0(\tau_b) = x_b$, il suffit de choisir

$$y_0(\tau) = \frac{1}{\sinh\omega T}\left[x_b \sinh\omega(\tau - \tau_a) + x_a \sinh\omega(\tau_b - \tau)\right]$$

Ceci permet de calculer

$$y_0(\tau_b)\dot{y}_0(\tau_b) - y_0(\tau_a)\dot{y}_0(\tau_a) = \frac{\omega\cosh\omega T}{\sinh\omega T}\left(x_a^2 + x_b^2\right) - \frac{2\omega x_a x_b}{\sinh\omega T}$$

On doit ensuite calculer

$$\int_{\tau_a}^{\tau_b} j(\tau)y(\tau)\mathrm{d}\tau = \int_{\tau_a}^{\tau_b} j(\tau)\mathrm{d}\tau\left[y_0(\tau) + \int_{\tau_a}^{\tau_b}\mathrm{d}\tau' G(\tau,\tau')j(\tau')\right]$$

Il existe une autre contribution à $x_b\dot{x}_b - x_a\dot{x}_a$ venant, par exemple pour $x_b$, de

$$x_b\int_{\tau_a}^{\tau_b}\dot{G}(\tau_b,\tau)j(\tau)\mathrm{d}\tau = -\frac{x_b}{\sinh\omega T}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\sinh\omega(\tau - \tau_a)j(\tau)\mathrm{d}\tau$$

Par ailleurs, on obtient de

$$-\frac{1}{2}\int_{\tau_a}^{\tau_b} y_0(\tau)j(\tau)\mathrm{d}\tau$$

la contribution

$$-\frac{x_b}{2\sinh\omega T}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\sinh\omega(\tau-\tau_a)j(\tau)\mathrm{d}\tau$$

et en ajoutant les deux contributions, un total

$$-\frac{x_b}{\sinh\omega T}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\sinh\omega(\tau-\tau_a)j(\tau)\mathrm{d}\tau$$

En résumé,

$$\begin{aligned}
y\dot{y}\Big|_{\tau_a}^{\tau_b} &= \frac{\omega\cosh\omega T}{\sinh\omega T}\left(x_a^2+x_b^2\right)-\frac{2\omega x_a x_b}{\sinh\omega T}\\
&\quad -\frac{x_b}{\sinh\omega T}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\sinh\omega(\tau-\tau_a)j(\tau)\mathrm{d}\tau\\
&\quad -\frac{x_a}{\sinh\omega T}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\sinh\omega(\tau_b-\tau)j(\tau)\mathrm{d}\tau
\end{aligned}$$

Intégration sur $x_a$ et $x_b$. Définissons

$$\begin{aligned}
I_a &= \int_{\tau_a}^{\tau_b}\sinh\omega(\tau_b-\tau)j(\tau)\mathrm{d}\tau \qquad & y_a=\frac{x_a}{\sinh\omega T}I_a\\
I_b &= \int_{\tau_a}^{\tau_b}\sinh\omega(\tau-\tau_a)j(\tau)\mathrm{d}\tau \qquad & y_b=\frac{x_b}{\sinh\omega T}I_b
\end{aligned}$$

L'intégrale à calculer est une gaussienne ($i=a,b$)

$$\begin{aligned}
&\int \mathrm{d}x_a\mathrm{d}x_b\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}x_iA_{ij}x_j+\sum_{i=1}^{2}x_iy_i\right]\\
&=\frac{2\pi}{(\det A)^{1/2}}\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}y_iA_{ij}^{-1}y_j\right]
\end{aligned}$$

La matrice $A^{-1}$ est donnée par

$$A^{-1}=\frac{1}{2\omega}\begin{pmatrix}1 & \mathrm{e}^{-\omega T}\\ \mathrm{e}^{-\omega T} & 1\end{pmatrix}$$

Comme l'origine des temps est arbitraire, il sera commode de choisir $\tau_a=0$, $\tau_b=T$

$$\begin{aligned}
I_a &= \int_{\tau_a}^{\tau_b}\sinh\omega(T-\tau)j(\tau)\mathrm{d}\tau \qquad & y_a=\frac{x_a}{\sinh\omega T}I_a\\
I_b &= \int_{\tau_a}^{\tau_b}\sinh\omega\tau\, j(\tau)\mathrm{d}\tau \qquad & y_b=\frac{x_b}{\sinh\omega T}I_b
\end{aligned}$$

L'expression provenant de l'intégrale gaussienne que nous devons évaluer est

$$X = I_a^2 + I_b^2 + 2\mathrm{e}^{-\omega T} I_a I_b$$

On montre d'abord la première identité

$$\begin{aligned}\left(\mathrm{e}^{-\omega T} I_a \right. &+ \left. I_b\right)\left(\mathrm{e}^{\omega T} I_a + I_b\right) \\ &= I_a^2 + I_b^2 + 2I_a I_b \cosh\omega t = \sinh^2\omega T \int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' \mathrm{e}^{\omega(\tau-\tau')} j(\tau)j(\tau')\end{aligned}$$

d'où

$$X = \sinh^2\omega t \int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' \mathrm{e}^{\omega(\tau-\tau')} j(\tau)j(\tau') - 2I_a I_b \sinh\omega T$$

Le terme en $-2I_a I_b \sinh\omega T$ se combine avec l'intégrale double

$$\begin{aligned}Y = &- \frac{1}{2\omega\sinh\omega T} \int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' \sinh\omega(T-\tau)\sinh\omega\tau' j(\tau)j(\tau') \\ &\quad \times[\theta(\tau-\tau') + \theta(\tau'-\tau)] \\ &+ \frac{1}{\omega\sinh\omega T} \int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' \sinh\omega(T-\tau)\sinh\omega\tau' j(\tau)j(\tau')\theta(\tau-\tau')\end{aligned}$$

On utilise

$$\theta(\tau-\tau') + \theta(\tau'-\tau) - 2\theta(\tau-\tau') = -\varepsilon(\tau-\tau')$$

où $\varepsilon(x)$ est la fonction signe de $x$, pour écrire

$$\begin{aligned}Y &= -\frac{1}{2\omega\sinh\omega T} \int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' \sinh\omega(T-\tau)\sinh\omega\tau' j(\tau)j(\tau')\varepsilon(\tau-\tau') \\ &= -\frac{1}{2\omega\sinh\omega T} \int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' (\sinh\omega T\cosh\omega\tau - \cosh\omega T\sinh\omega\tau) \\ &\quad \times \sinh\omega\tau' j(\tau)j(\tau')\varepsilon(\tau-\tau') \\ &= -\frac{1}{2\omega\sinh\omega T} \int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' \sinh\omega T\cosh\omega\tau\sinh\omega\tau' j(\tau)j(\tau')\varepsilon(\tau-\tau') \\ &= \frac{1}{8\omega} \int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' \left[\mathrm{e}^{\omega(\tau-\tau')} - \mathrm{e}^{-\omega(\tau-\tau')}\right] j(\tau)j(\tau')\varepsilon(\tau-\tau')\end{aligned}$$

En combinant avec le premier terme de $X$, on voir apparaître la combinaison

$$\begin{aligned}&\mathrm{e}^{\omega(\tau-\tau')}\left[\theta(\tau-\tau') + \theta(\tau'-\tau) + \varepsilon(\tau-\tau')\right] \\ &\quad + \mathrm{e}^{-\omega(\tau-\tau')}\left[\theta(\tau-\tau') + \theta(\tau'-\tau) - \varepsilon(\tau-\tau')\right] \\ &= 2\left[\mathrm{e}^{-\omega(\tau-\tau')}\theta(\tau-\tau') + \mathrm{e}^{-\omega(\tau'-\tau)}\theta(\tau'-\tau)\right] = 2\mathrm{e}^{-\omega|\tau-\tau'|}\end{aligned}$$

Le propagateur euclidien est donc bien

$$D_E(\tau) = \frac{1}{2\omega}\,\mathrm{e}^{-\omega|\tau|}$$

**6.** Le terme qui projette sur l'état fondamental pour $t_a \to \infty$ est

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht_a} \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}E_n t_a}$$

pour un état $n$. Pour que ce facteur tende vers zéro si $E_n \neq 0$ pour $t_a \to -\infty$, il faut que $t_a$ ait une partie imaginaire positive. De même, pour

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht_b} \to \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t_a b}$$

il faut que $t_b$ ait une partie imaginaire négative. Dans ces conditions, $\theta(\tau - \tau')$ se prolonge analytiquement en $\theta(t - t')$, et le propagateur euclidien devient le propagateur de Feynman

$$D_F(t) = \frac{1}{2\omega}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\theta(t) + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\theta(-t)\right]$$

### 12.7.10 Probabilités de transition à l'approximation adiabatique

**1.** Afin de simplifier les notations, nous noterons par convention $\mathcal{P} = \mathcal{P}(t)$, et nous expliciterons $\mathcal{P}(0)$ quand $t = 0$. De $\sum_j \mathcal{P}_j^2 = I$, on déduit

$$\sum_j \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}_j = -\sum_j \mathcal{P}_j\,\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t}$$

Écrivons l'équation d'évolution de $\mathcal{P}_j(t) = A(t)\mathcal{P}_j(0)A^\dagger(t)$

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}(0)A^\dagger(t) + A(t)\mathcal{P}_j(0)\,\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}A^\dagger}{\mathrm{d}t}$$

et reportant $\mathrm{i}\mathrm{d}A/\mathrm{d}t = K(t)A(t)$, on trouve l'équation d'évolution pour $\mathcal{P}_j$

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t} = K(t)A(t)\mathcal{P}_j(0)A^\dagger(t) - A(t)\mathcal{P}_j(0)A^\dagger(t)K(t) = [K(t), \mathcal{P}_j(t)]$$

Calculons le commutateur $[K(t), A(t)]$, en remarquant que $\mathcal{P}_j(t)\mathcal{P}_l(t) = \delta_{jl}\mathcal{P}_l(t)$

$$\begin{aligned}
[K(t), \mathcal{P}_l(t)] &= \mathrm{i}\left[\sum_j \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}_j(t), \mathcal{P}(t)\right] = \mathrm{i}\sum_j \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}_j(t)\mathcal{P}_l(t) \\
&\quad + \mathrm{i}\sum_j \mathcal{P}_l(t)\mathcal{P}_j(t)\,\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t} \\
&= \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_l}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}_l(t) + \mathrm{i}\mathcal{P}_l(t)\,\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_l}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathcal{P}_l^2\right) = \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_l}{\mathrm{d}t}
\end{aligned}$$

ce qui donne le résultat recherché pour $\mathrm{i}\mathrm{d}\mathcal{P}_l/\mathrm{d}t$. D'autre part,

$$\mathcal{P}_l K \mathcal{P}_l = \mathrm{i}\sum_j \mathcal{P}_l \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}_j\mathcal{P}_l = \mathrm{i}\mathcal{P}_l\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_l}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}_l = 0$$

En effet, de $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$ on obtient

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t} = \mathcal{P}\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}$$

soit, en multipliant à droite par $\mathcal{P}$

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t}\mathcal{P} = \mathcal{P}\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t}\mathcal{P} + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}^2 \Longrightarrow \mathcal{P}\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t}\mathcal{P} = 0$$

**2.** L'équation d'évolution de $\Phi(t)$ est

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}t} = \sum_j E_j(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_j(t)}\,\mathcal{P}_j(0) = H^{(A)}(t)\Phi(t)$$

D'autre part,

$$A(t)\Phi(t)|\varphi_l(0)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_l(t)}\,A(t)|\varphi_l(0)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_l(t)}\,|\varphi_l(t)\rangle$$

et donc $U_A(t,0) = A(t)\Phi(t)$ transforme $|\varphi_l(0)\rangle$ en $|\varphi_l(t)\rangle$, au facteur de phase dynamique $\exp[-\mathrm{i}\alpha_l(t)]$ près. Le calcul qui suit est calqué sur celui menant du point de vue de Schrödinger à celui de l'interaction si l'on définit

$$\hat{U}(t,0) = \Phi^\dagger(t)A^\dagger(t)U(t,0)$$

On remarque que

$$A(t)H^{(A)}(t)A^\dagger(t) = \sum_j E_j(t)\mathcal{P}_j(t) = H(t)$$

On obtient ensuite

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} \quad &= \quad -\Phi^\dagger(t)H^{(A)}(t)A^\dagger(t)U(t,0) - \Phi^\dagger(t)A^\dagger(t)K(t)U(t,0)\\ &\quad + \Phi^\dagger(t)A^\dagger(t)H(t)U(t,0)\end{aligned}$$

Mais on a également

$$\Phi^\dagger H^{(A)}A^\dagger U = \Phi^\dagger A^\dagger A H^{(A)}A^\dagger U = \Phi^\dagger A^\dagger H(t)U$$

et par conséquent,

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} = -\Phi^\dagger A^\dagger K A\Phi\hat{U}$$

**3.** À l'ordre zéro de la théorie des perturbations $\hat{U}(t,0) = I$, et au premier ordre, on peut écrire

$$\hat{U}(t,0) = I - \mathrm{i}\int_0^t W(t')\mathrm{d}t'$$

Le deuxième terme de cette équation va donner des transitions entre des états de $j$ différent. Si le système est à $t = 0$ dans l'état $|\varphi_m(0)\rangle$, l'amplitude de probabilité de le trouver au temps $t$ dans $|\varphi_k(t)\rangle$ est

$$\begin{aligned} a_{km}(t) &= \langle\varphi_k(t)|U(t,0)|\varphi_m(0)\rangle = \langle\varphi_k(t)|A(t)\Phi(t)\hat{U}(t,0)|\varphi_m(0)\rangle \\ &\simeq \delta_{km} - \mathrm{i}\langle\varphi_k(t)|A(t)\Phi(t)\left[\int_0^t W(t')\mathrm{d}t'\right]|\varphi_m(0)\rangle \end{aligned}$$

d'où

$$\mathsf{p}_{m\to k}(t) \simeq |\langle\varphi_k(t)|A(t)\Phi(t)F(t)|\varphi_m(0)\rangle|^2$$

avec

$$F = \int_0^t W(t')\mathrm{d}t' = \int_0^t \Phi^\dagger(t')A^\dagger(t')K(t')A(t')\Phi(t')\mathrm{d}t'$$

Prenant en compte

$$|\varphi_l(t)\rangle = A(t)|\varphi_l(0)\rangle$$

la probabilité $\mathsf{p}_{m\to k}(t)$ se simplifie

$$\mathsf{p}_{m\to k}(t) = |\langle\varphi_k(0)|F|\varphi_m(0)\rangle|^2$$

Évaluons l'élément de matrice

$$\begin{aligned} &\langle\varphi_k(0)|\Phi^\dagger(t')A^\dagger(t')K(t')A(t')\Phi(t')|\varphi_m(0)\rangle \\ &= \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}[\alpha_k(t')-\alpha_m(t')]}\,\langle\varphi_k(0)|A^\dagger(t')K(t')A(t')|\varphi_m(0)\rangle \\ &= \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}[\alpha_k(t')-\alpha_m(t')]}\,\langle\varphi_k(t')|\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_m}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(t')\rangle \end{aligned}$$

où nous avons utilisé l'expression de $K$ en fonction des projecteurs. Nous pouvons simplifier le résultat en remarquant que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(t)\rangle = \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(0)\rangle = \sum_l \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_l}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}_l A(t)|\varphi_m(0)\rangle = \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_m}{\mathrm{d}t}\,|\varphi_m(t)\rangle$$

et nous obtenons donc (12.53)

$$\mathsf{p}_{m\to k}(t) \simeq \left|\int_0^t \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}[\alpha_k(t')-\alpha_m(t')]}\langle\varphi_k(t')|\dot{\varphi}_m(t')\rangle\,\mathrm{d}t'\right|^2$$

Nous pouvons simplifier le résultat en observant que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(t)\rangle = \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(0)\rangle = \sum_l \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_l}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}_l A(t)|\varphi_m(0)\rangle = \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_m}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(t)\rangle$$

et par conséquent,

$$\mathsf{p}_{m\to k}(t) \simeq \left| \int_0^t \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}[\alpha_k(t')-\alpha_m(t')]} \langle \varphi_k(t') | \dot{\varphi}_m(t') \rangle \right|^2$$

**4.** De l'équation

$$|\dot{\varphi}_m(t)\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big[\mathcal{P}_m(t)|\varphi_m(t)\rangle\Big] = \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_m}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(t)\rangle + \mathcal{P}_m(t)|\dot{\varphi}_m(t)\rangle$$

on déduit par comparaison avec les résultats de la question **3**

$$\mathcal{P}_m(t)|\dot{\varphi}_m(t)\rangle = 0$$

et donc

$$\langle \varphi_m(t)|\dot{\varphi}_m(t)\rangle = \langle \varphi_m(t)|\mathcal{P}_m|\dot{\varphi}_m(t)\rangle = 0$$

**5.** Si $\hat{n}$ est le vecteur de Bloch du spin, les projecteurs $\mathcal{P}_1$ et $\mathcal{P}_2$ sur $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont

$$\mathcal{P}_1 = \frac{1}{2}\,(I + \vec{\sigma}\cdot\hat{n}) \qquad\qquad \mathcal{P}_2 = \frac{1}{2}\,(I - \vec{\sigma}\cdot\hat{n})$$

et on trouve

$$\mathcal{P}_1\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_1}{\mathrm{d}t} + \mathcal{P}_2\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_2}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{2}\,\vec{\sigma}\cdot\left(\hat{n}\times\frac{\mathrm{d}\hat{n}}{\mathrm{d}t}\right) = \frac{\mathrm{i}}{2}\,\dot{\phi}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{a}$$

où le vecteur $\vec{a}$ est donné par

$$\vec{a} = (-\sin\theta\cos\theta\cos\phi, -\sin\theta\cos\theta\sin\phi, \sin^2\theta)$$

et l'opérateur $K(t)$ vaut

$$K(t) = \frac{1}{2}\,\dot{\phi}(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})$$

On en déduit $A(t)$ pour $t$ infinitésimal ($\dot{\phi} = \omega$)

$$A(t) = I - \frac{\mathrm{i}\omega t}{2}\,\sin\theta \begin{pmatrix} \sin\theta & -\cos\theta \\ -\cos\theta & \sin\theta \end{pmatrix} + O(t^2)$$

Á partir de cette expression, on montre facilement que

$$\langle \varphi_1|\dot{\varphi}_1\rangle\Big|_{t=0} = 0$$

# 20.13 Exercices du chapitre 13

## 13.5.1 Pic de Gamow

**1.** Calculons l'énergie coulombienne pour $R = 1\,\mathrm{fm}$

$$E_0 = \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)\left(\frac{\hbar c}{R}\right) = \frac{1}{137}\times 200\,\mathrm{MeV} \simeq 1.5\,\mathrm{MeV}$$

La température au centre du Soleil est de l'ordre de $1.5 \times 10^7\,$K, correspondant à une énergie cinétique $E$ de 1.5 keV environ. On a donc bien $E \ll e^2/R$.

**2.** On définit la distance $R_N$ comme la distance où le potentiel coulombien est égal à l'énergie cinétique : $e^2/R_N = E$. L'intégrale à évaluer pour l'effet tunnel est

$$I = \int_R^{R_N} \mathrm{d}r \left(\frac{e^2}{r} - E\right)^{1/2}$$

On effectue le changement de variables

$$u^2 = \frac{e^2}{r} - E \qquad \mathrm{d}r = -\frac{2e^2 u \mathrm{d}u}{(u^2+E)^2}$$

Les limites d'intégration sont

$$u = 0 \quad \text{et} \quad u^2 = \frac{e^2}{R} - E \simeq \frac{e^2}{R}$$

ce qui donne

$$I = 2e^2 \left[\frac{1}{2\sqrt{E}} \tan^{-1}\sqrt{\frac{e^2}{RE}} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{R}{e^2}}\right] \simeq \frac{\pi e^2}{2\sqrt{E}}$$

La probabilité de l'effet tunnel est

$$\ln \mathsf{p}_T(E) = -\frac{\sqrt{2\mu}\ \pi e^2}{\hbar\sqrt{E}}$$

Définissant

$$E_B = \frac{2\mu\pi^2 e^4}{\hbar^2}$$

on met la probabilité de l'effet tunnel sous la forme

$$\mathsf{p}_T(E) \simeq \exp\left(-\sqrt{\frac{E_B}{E}}\right)$$

Numériquement, avec $\mu = 6m_p/5$

$$E_B = 2\pi^2\alpha^2\mu c^2 = 1.18\,\mathrm{MeV}$$

**3.** Le facteur $\sim 4\pi/k^2$ est un facteur géométrique qui doit apparaître dans la section efficace totale : *cf.* (13.52). Il donne un ordre de grandeur de la section efficace totale en l'absence d'autre information. Ici, nous devons tenir compte en plus de l'effet tunnel : la barrière de potentiel doit être franchie, sinon la réaction n'a pas lieu. Un ordre de grandeur de la section efficace est obtenu en multipliant le facteur géométrique par la probabilité de l'effet tunnel

$$\sigma(E) \sim \frac{4\pi}{k^2}\,\mathsf{p}_T(E)$$

**3.** L'intégrale angulaire donne un facteur $4\pi v^2$ et la valeur moyenne de $v\sigma$ est donnée par

$$\langle v\sigma\rangle = 4\pi \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \int_0^\infty \mathrm{d}v\, v^3 \sigma(v) \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2k_B T}\right)$$

On effectue le changement de variables $v \to E$

$$E = \frac{1}{2}\,\mu v^2 \qquad\qquad \sigma(E) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu E}\,\mathsf{p}_T(E) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu E}\,\exp\left(-\sqrt{\frac{E_B}{E}}\right)$$

ce qui donne

$$\langle v\sigma\rangle = \frac{16\pi^2\hbar^2}{\mu^3}\left(\frac{\mu}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \int_0^\infty \mathrm{d}E\, \mathrm{e}^{-E/(k_B T)} \mathrm{e}^{-\sqrt{E_B/E}}$$

On doit étudier l'intégrale

$$J = \int_0^\infty \mathrm{d}E\, \mathrm{e}^{-E/(k_B T)}\, \mathrm{e}^{-\sqrt{E_B/E}}$$

Définissons la fonction $f(E)$ par ($\beta = 1/(k_B T)$)

$$f(E) = \beta E - \sqrt{\frac{E_B}{E}} \qquad\qquad f'(E) = \beta - \frac{\sqrt{E_B}}{2E^{3/2}}$$

Le maximum de $\exp[-f(E)]$ est atteint pour $E = E_0$, où $E_0$ vérifie $f'(E_0) = 0$

$$E_0 = \left[\frac{1}{2}\, k_B T \sqrt{E_B}\right]^{2/3}$$

et l'on trouve

$$f(E_0) = -\frac{1}{2}\left(\frac{2E_B}{k_B T}\right)^{1/3} \simeq -5.8$$

La largeur du pic de $\exp(-f(E)$ s'obtient en étudiant la dérivée seconde

$$f''(E_0) = \frac{3}{4}\sqrt{E_B}\; E_0^{-5/2} = \frac{3}{4}\left(\frac{1}{2}\right)^{-5/3} E_B^{-1/3}(k_B T)^{-5/3}$$

et la largeur du pic est

$$\Delta E \sim E_B^{1/6}(k_B T)^{5/6} = 4.5\,\mathrm{keV}$$

### 13.5.2 Diffusion de neutrons de basse énergie par une molécule d'hydrogène

**1.** Soit $r_1$ la distance entre le noyau 1 et le détecteur

$$\vec{r}_1 = \vec{r} - \frac{1}{2}\,\vec{R} \qquad r_1 \simeq r - \frac{1}{2}\,\vec{R}\cdot\hat{r}$$

L'amplitude pour trouver l'onde au détecteur après une diffusion par le noyau 1 est proportionnelle à

$$\frac{1}{r_1}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr_1} \simeq \frac{1}{r}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\left(1 + \frac{\vec{R}\cdot\hat{r}}{2r}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\,'\cdot\vec{R}/2}$$

avec $\vec{k}\,' = k\hat{r}$. Il faut multiplier ce résultat par l'amplitude pour trouver l'onde plane incidente en $\vec{r}_1$ qui vaut $\exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}/2)$ et par $a_1$. L'amplitude de diffusion par le noyau 1 est finalement

$$\begin{aligned}&\frac{a_1}{r}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\left(1 + \frac{\vec{R}\cdot\hat{r}}{r}\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{2}(\vec{k} - \vec{k}\,')\cdot\vec{R}\right)\\ &= \frac{a_1}{r}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\left(1 + \frac{\vec{R}\cdot\hat{r}}{2r}\right)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2}\vec{q}\cdot\vec{R}\right)\end{aligned}$$

En ajoutant les amplitudes provenant des noyaux 1 et 2, on obtient l'amplitude de diffusion $a$ comme le coefficient de $(\exp\mathrm{i}kr)/r$

$$a = a_1 + a_2 - \frac{\mathrm{i}}{2}\,(a_1 - a_2)\vec{q}\cdot\vec{R}$$

Les termes en $R/r$ sont négligeables car $r \to \infty$.

**2.** La distance entre les deux protons est voisine de 0.1 nm. Si $q = 10^{10}\,\mathrm{m}^{-1}$, l'énergie du neutron est

$$E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_n} = 2\,\mathrm{meV}$$

ce qui correspond à une température de 1 K. En négligeant le terme en $(\vec{q}\cdot\vec{R})$

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \frac{1}{4}(a_s + 3a_t)I + \frac{1}{4}(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_1) + \frac{1}{4}(a_s + 3a_t)I + \frac{1}{4}(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_2)\\ &= \frac{1}{2}(a_s + 3a_t)I + \frac{1}{2}(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\Sigma})\end{aligned}$$

**3.** La masse réduite est $(m_p \simeq m_n = m)$

$$\mu_{H_2} = \frac{2m^2}{m + 2m} = \frac{2m}{3}$$

alors que la masse réduite neutron-proton est $\mu_p = m/2$. Le potentiel effectif est de la forme (13.41) avec une constante $g$ donnée par

$$g = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}\, a$$

Pour une valeur identique de $g$, on a donc des longueurs de diffusion dans le rapport

$$\frac{a_{H_2}}{a_p} = \frac{\mu_{H_2}}{\mu_p} = \frac{4}{3}$$

**4.** La section efficace totale s'obtient en calculant $\hat{a}^2$

$$\hat{a}^2 = \frac{1}{4}(a_s + 3a_t)^2 I + \frac{1}{2}(a_s + a_t)(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\Sigma}) + \frac{1}{4}(a_t - a_s)^2(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\Sigma})^2$$

et, pour une diffusion de neutrons sur des molécules non polarisées

$$\sigma_{\text{tot}} = 4\pi \text{Tr}\, \hat{a}^2$$

Dans le parahydrogène, la valeur moyenne de $\vec{\Sigma}$ est nulle et

$$\sigma_{\text{tot}}^{\text{para}} = \pi(a_s + 3a_t)^2$$

Pour l'orthohydrogène, on remarque que

$$\text{Tr}\,(A \otimes B)^2 = \text{Tr}\,(A^2 \otimes B^2) = \text{Tr}\, A^2\, \text{Tr}\, B^2$$

Comme

$$\text{Tr}\, \sigma_{ni}\sigma_{nj}\Sigma_i\Sigma_j \propto \delta_{ij}$$

on obtient

$$\begin{aligned} \text{Tr}\,(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\Sigma})^2 &= \text{Tr}\left[\sigma_{nx}^2\Sigma_x^2 + \sigma_{ny}^2\Sigma_y^2 + \sigma_{nz}^2\Sigma_z^2\right] \\ &= 2\text{Tr}\left[\Sigma_x^2 + \Sigma_y^2 + \Sigma_z^2\right] = 2\text{Tr}\,\vec{\Sigma}^2 = 12 \end{aligned}$$

La section efficace non polarisée comprend un facteur 1/6 dû à la moyenne sur les spins initiaux (1/2 pour le neutron et 1/3 pour l'orthohydrogène) et

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tot}}^{\text{ortho}} &= \frac{4\pi}{6}\left[\frac{1}{4}(a_s + 3a_t)^2 \times 6 + \frac{1}{4}(a_t - a_s)^2 \times 12\right] \\ &= \sigma_{\text{tot}}^{\text{para}} + 2\pi(a_t - a_s)^2 \end{aligned}$$

### 13.5.3 Propriétés analytiques de l'amplitude de diffusion neutron-proton

**1.** La fonction d'onde radiale est

$$r < R \;:\; u(r) = A \sin k' R \qquad r > R \;:\; u(r) = N \mathrm{e}^{-\kappa r}$$

La condition de continuité de la fonction d'onde à $r = R$ donne

$$A \sin k'R = N\mathrm{e}^{-\kappa R}$$

et celle de la dérivée logarithmique

$$\cot \kappa R = -\frac{\kappa}{k'} \qquad \sin k'R = \frac{k'}{\sqrt{\kappa^2 + k'^2}} \qquad \cos k'R = -\frac{\kappa}{\sqrt{\kappa^2 + k'^2}}$$

soit

$$A = N\mathrm{e}^{-\kappa R}\,\frac{\sqrt{\kappa^2 + k'^2}}{k'}$$

La normalisation est donnée par les deux intégrales

$$J_< = A^2 \int_0^R \mathrm{d}r\, \sin^2 k'r = \frac{N^2\mathrm{e}^{-2\kappa R}}{2k'}\left[\kappa + R({k'}^2 + \kappa^2)\right]$$

$$J_> = N^2 \int_R^\infty \mathrm{d}r\, \mathrm{e}^{-2\kappa r} = \frac{N^2}{2\kappa}\,\mathrm{e}^{-2\kappa R}$$

et la somme $J_< + J_>$ vaut

$$J_< + J_> = \frac{N^2\mathrm{e}^{-2\kappa R}}{2{k'}^2\kappa}\,({k'}^2 + \kappa^2)(1 + \kappa R)$$

d'où $N^2$

$$N^2 = \frac{2\kappa {k'}^2\,\mathrm{e}^{2\kappa R}}{(\kappa^2 + {k'}^2)(1 + \kappa R)}$$

**2.** La fonction $g(-k, r)$ est linéairement indépendante de $g(k, r)$ car elle se comporte à l'infini comme $\exp(-\mathrm{i}kr)$. La solution la plus générale de l'équation de Schrödinger est une combinaison linéaire de ces deux solutions, et comme $u(k, r)$ doit de plus s'annuler à $r = 0$, on a

$$u(k, r) = g(-k, r)g(k) - g(k, -r)g(-k) \qquad g(k) = g(k, r = 0)$$

Le comportement $r \to \infty$ de $u(k, r)$ est alors

$$r \to \infty \quad : \quad u(k, r) \propto \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\, g(k) - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\, g(-k)$$

La comparaison avec (13.22) pour $l = 0$ montre alors que

$$S(k) = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta(k)} = \frac{g(k)}{g(-k)}$$

**3.** Prolongeons $g(k, r)$ à des valeurs complexes de $k$ : $g^*(k, r)$ et $g(-k^*, r)$ vérifient les équations différentielles

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\, g^*(k, r) + \left[{k^*}^2 - 2mV(r)\right] g^*(k, r) &= 0 \\
\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\, g(-k^*, r) + \left[{k^*}^2 - 2mV(r)\right] g(-k^*, r) &= 0
\end{aligned}$$

Écrivant $k = k_1 + \mathrm{i}k_2$, nous observons les comportements asymptotiques suivants

$$\begin{aligned} g^*(k,r) &\propto \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right)^* = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 r}\,\mathrm{e}^{-k_2 r} \\ g(-k^*,r) &\propto \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k^* r} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 r}\,\mathrm{e}^{-k_2 r} \end{aligned}$$

Les deux fonctions vérifient la même équation différentielle et ont le même comportement à l'infini, et elles sont donc égales. On en déduit $g^*(k^*) = g(-k)$, d'où

$$S^*(k^*) = \frac{g^*(k^*)}{g^*(-k^*)} = \frac{g(-k)}{g(k)} = \frac{1}{S(k)}$$

et

$$S(-k) = \frac{g(-k)}{g(k)} = \frac{1}{S(k)} = S^*(k^*)$$

**4.** Le comportement de la fonction $g(k,r)$ est donné pour $r < R$ et $r > R$ par

$$\begin{aligned} r < R \qquad g(k,r) &= A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'r} + C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'r} \\ r > R \qquad g(k,r) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr} \end{aligned}$$

Les conditions de continuité de $g(k,r)$ et de sa dérivée donnent

$$\begin{aligned} A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'R} + C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'R} &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kR} \\ k'\left(A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'R} - C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'R}\right) &= k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kR} \end{aligned}$$

avec $k' = \sqrt{M(V_0 + E)}$. On en déduit

$$g(k) = A + C = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kR}\left(\cos k'R + \mathrm{i}\frac{k}{k'}\,\sin k'R\right)$$

On constate que $g(k)$ est bien une fonction entière de $k$. Le seul point délicat pourrait être le point $k' = 0$ en raison de la racine carrée dans la définition de $k'$, mais $\cos k'R$ et $(1/k')\sin k'R$ sont des fonctions analytiques de ${k'}^2$.

**5.** Supposons que $S(k)$ possède un pôle sur l'axe imaginaire positif à $k = \mathrm{i}\kappa$, $\kappa > 0$. On a alors $g(-k) = g(-\mathrm{i}\kappa) = 0$ et le comportement asymptotique de $u(k,r)$ est

$$\begin{aligned} r \to \infty \quad : \quad u(k,r) &\sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\,g(k) + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\,g(-k) \\ &\sim \mathrm{e}^{-\kappa r}\,g(k) + \mathrm{e}^{\kappa r}\,g(-k) \end{aligned}$$

$u(k,r)$ explose si $r \to \infty$, sauf si $g(-k) = 0$, et alors $u(k,r)$ est la fonction d'onde d'un état lié

$$u(k,r) = g(k)g(-k,r)$$

qui s'annule automatiquement à $r = 0$. Les pôles de $S(k)$ sur l'axe imaginaire tels que $0 < \operatorname{Im} k < \mu/2$ donnent donc l'énergie des états liés. Supposons

maintenant un pôle de $S(k)$ à $k = h - \mathrm{i}b$. En raison des propriétés démontrées à la question **3**, $S(k)$ a aussi un pôle à $k = -h - \mathrm{i}b$. Si $b < 0$, $g(h + \mathrm{i}b, r)$ et $g(-h + \mathrm{i}b, r)$ sont des fonctions de carré sommable (elles se comportent comme $\exp(-|b|r)$ à l'infini) et comme elles sont solutions de l'équation de Schrödinger, elles sont orthogonales

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, g(h + \mathrm{i}b, r) g(-h + \mathrm{i}b, r) = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, |g(h + \mathrm{i}b, r)|^2 = 0$$

et nous avons une contradiction si $b < 0$. Si $h \neq 0$, la seule possibilité est d'avoir des pôles tels que $\mathrm{Im}\, k < 0$.

**6.** Le choix de $S(k)$

$$S(k) = \frac{(k - h - \mathrm{i}b)(k + h - \mathrm{i}b)}{(k - h + \mathrm{i}b)(k + h + \mathrm{i}b)} \simeq \frac{k - h - \mathrm{i}b}{k - h + \mathrm{i}b} \quad \text{pour } k \sim h$$

obéit aux propriétés de la question **3**. La relation entre $\cot \delta$ et $S$ est

$$\cot \delta = \mathrm{i}\, \frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta} + 1}{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta} - 1} = \mathrm{i}\, \frac{S + 1}{S - 1} = \frac{h - k}{b}$$

soit

$$\delta(k) = \tan^{-1} \frac{-b}{k - h}$$

Le déphasage $\delta$ croît de $\delta(k) = \tan^{-1} b/h$ pour $k = 0$ à $\pi$ pour $k \to \infty$, en passant par $\pi/2$ pour $k = h$. La section efficace totale vaut

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta = \frac{4\pi}{k^2(1 + \cot^2 \delta)} = \frac{4\pi b^2}{k^2[(k - h)^2 + b^2]}$$

Posons

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad h^2 = \frac{2mE_0}{\hbar^2}$$

$$k - h = \frac{k^2 - h^2}{k + h} \simeq \frac{k^2 - h^2}{2h} = \frac{m(E^2 - E_0^2)}{\hbar\sqrt{2mE_0}}$$

On trouve

$$\sigma(E) = \frac{2\pi\hbar^2}{ME} \frac{\hbar^2\Gamma^2/4}{(E - E_0)^2 + \hbar^2\Gamma^2/4}$$

à condition de poser

$$\frac{\hbar^2\Gamma^2}{4} = \frac{2E_0\hbar^2 b^2}{m}$$

**7.** Partons de l'équation de Schrödinger radiale

$$u'' - 2mVu + k^2 u = 0$$

et différentions cette équation par rapport à $k$

$$\frac{\partial u''}{\partial k} - 2mV\frac{\partial u}{\partial k} + k^2\frac{\partial u}{\partial k} = -2uk$$

Multiplions la première équation par $\partial u/\partial k$ et la seconde par $u$ et retranchons

$$u''\frac{\partial u}{\partial k} - u\frac{\partial u''}{\partial k} = 2ku^2$$

soit

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(u'\frac{\partial u}{\partial k} - u\frac{\partial u'}{\partial k}\right) = 2ku^2$$

et en intégrant sur $r$

$$u'\frac{\partial u}{\partial k} - u\frac{\partial u'}{\partial k} = 2k\int_0^r u^2(r')\mathrm{d}r'$$

Pour $r \to 0$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial k}\right|_{r=0} = \left[A'(k)\sin k'r + A(k)r\frac{\partial k'}{\partial k}\,\cos k'r\right]_{r=0} = 0$$

En outre,

$$\frac{\partial u}{\partial k} = g(k,r)g'(-k) + O\left(\mathrm{e}^{-\kappa r}\right)$$

et pour un état lié

$$u(k,r) = g(-k,r)g(k) \Longrightarrow \text{ si } r \to \infty \ u'(k,r) = \mathrm{i}ku(k,r)$$

Par conséquent, pour $r \to \infty$

$$u'\frac{\partial u}{\partial k} - u\frac{\partial u'}{\partial k} \to 2\,\mathrm{i}\,k\,g(\mathrm{i}\kappa)[g'(-\mathrm{i}\kappa)]$$

Au voisinage du pôle $k = \mathrm{i}\kappa$, $g(-k)$ est proportionnel à $(k - \mathrm{i}\kappa)$

$$g(-k) \simeq D(k - \mathrm{i}\kappa)$$

et donc $g'(-k) = -D$. Posons $g(\mathrm{i}\kappa) = F$, on obtient

$$-2\mathrm{i}kDF = 2k\int_0^\infty u^2(k,r)\,\mathrm{d}r$$

Le comportement $r \to \infty$ de $u(k,r)$ est

$$r \to \infty \ : \ u(k,r) \simeq g(\mathrm{i}\kappa)\mathrm{e}^{-\kappa r} = F\mathrm{e}^{-\kappa r}$$

Soit $\overline{u}(k,r) = Gu(k,r)$, la fonction d'onde normalisée de l'état lié, qui se comporte à l'infini comme $N\exp(-\kappa r)$, où $N$ est la constante définie à la question **1**, $N = FG$. Nous avons, d'une part,

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, u^2(k,r) = -\mathrm{i}DF$$

et, d'autre part,

$$1 = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, \overline{u}^2(k,r) = G^2 \int_0^\infty \mathrm{d}r\, u^2(k,r) = -\mathrm{i}FG^2 = -\mathrm{i}(FG)^2 \frac{D}{F} = -\mathrm{i}N^2 \frac{D}{F}$$

Au voisinage du pôle à $k = \mathrm{i}\kappa$,

$$S(k) \simeq \frac{F}{D(k - \mathrm{i}\kappa)} = \frac{-\mathrm{i}N^2}{k - \mathrm{i}\kappa}$$

**8.** Exprimons $k\cot\delta$ en fonction de $g(k)$

$$k\cot\delta(k) = \frac{\mathrm{i}k[g(k) + g(-k)]}{g(k) - g(-k)]}$$

Cette fonction est analytique pour $k \sim 0$, tend vers une constante pour $k \to 0$ et c'est une fonction paire de $k$. On peut donc écrire son développement de Taylor

$$k\cot\delta(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2}r_0 k^2 + O(k^4)$$

Compte tenu de

$$S(k) = \frac{k\cot\delta(k) + \mathrm{i}k}{k\cot\delta(k) - \mathrm{i}k}$$

l'existence d'un pôle de $S(k)$ à $k_0 = \mathrm{i}\kappa$ entraîne

$$k_0\cot\delta(k_0) = \mathrm{i}k_0 = -\kappa \qquad\qquad -\frac{1}{a} - \frac{1}{2}r_0\kappa^2 = -\kappa$$

soit

$$r_0 = \frac{2}{\kappa}\left(1 - \frac{1}{\kappa a}\right)$$

Calculons le résidu au pôle

$$\begin{aligned} k\cot\delta - \mathrm{i}k &= k_0\cot\delta_0 + (k-k_0)\frac{\partial}{\partial k}k\cot\delta\Big|_{k=k_0} - \mathrm{i}k + \mathrm{i}k_0 - \mathrm{i}k_0 \\ &= -\mathrm{i}(k-k_0) + (k-k_0)\mathrm{i}\kappa r_0 = -\mathrm{i}(k-k_0)(1-\kappa r_0) \end{aligned}$$

soit

$$S(k) = \frac{-2\kappa}{-\mathrm{i}(k-k_0)(1-\kappa r_0)} \implies N^2 = \frac{2\kappa}{1-\kappa r_0}$$

### 13.5.5 Optique neutronique

**1.** La distance entre le noyau et le point d'observation est $r = \sqrt{s^2 + z^2}$. L'amplitude de probabilité totale au point d'observation s'obtient en sommant de façon cohérente les amplitudes provenant de chaque noyau

$$\varphi_d = -a\rho\delta \int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\, 2\pi s \mathrm{d}s = -2\pi a\rho\delta \int_z^\infty \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\, r\mathrm{d}r$$

car $r\mathrm{d}r = s\mathrm{d}s$. La borne supérieure de l'intégale est une fonction oscillante, mais cette oscillation n'est pas physique et on obtient l'amplitude totale

$$\varphi(z) = \left(1 - 2\mathrm{i}\pi\, \frac{a\rho\,\delta}{k}\right) \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}kz}$$

**2.** Si les neutrons traversent un milieu d'indice $n$ et d'épaisseur $\delta$ avec $k' = nk$

$$\begin{aligned} \varphi(z) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(z-\delta)}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k'\delta} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k'-k)\delta)} \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n-1)k\delta} \simeq \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}\, [1 + \mathrm{i}(n-1)k\delta] \end{aligned}$$

et par identification avec le résultat de la question **1**

$$n = 1 - \frac{2\pi a\rho}{k^2} = 1 - \frac{a\rho\lambda^2}{2\pi}$$

Comme l'indice de réfraction est très proche de un, l'angle de réflexion critique est proche de $\pi/2$

$$\sin(\pi/2 - \theta_c) = \cos\theta_c \simeq 1 - \frac{1}{2}\,\theta_c^2 = n$$

soit

$$\frac{1}{2}\,\theta_c^2 = 1 - n = \frac{a\rho\lambda^2}{2\pi} \qquad \theta_c = \lambda\left(\frac{\rho a}{\pi}\right)^{1/2}$$

**3.** La matrice de diffusion neutron-proton dans l'espace des spins est

$$\hat{f} = -\frac{1}{4}(a_s + 3a_t)I - \frac{1}{4}(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_p) = -a_s\mathcal{P}_s - a_t\mathcal{P}_t$$

Comme $|++\rangle$ est un état triplet

$$f_c = \langle + + |\hat{f}| + +\rangle = -a_t$$

Si $|\chi_s\rangle$ et $\chi_t\rangle$ sont les états singulet et triplet avec $m = 0$, la relation inverse de (10.125) et (10.126) est

$$\begin{aligned} |+-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_t\rangle + |\chi_s\rangle) \\ |-+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_t\rangle - |\chi_s\rangle) \end{aligned}$$

et

$$
\begin{aligned}
f_a &= \langle + - |\hat{f}| + - \rangle = -\frac{1}{2}(a_t + a_s) \\
f_b &= \langle + - |\hat{f}| - + \rangle = -\frac{1}{2}(a_t - a_s)
\end{aligned}
$$

Les poids 3/4 et 1/4 sont déterminés par la dégénérescence des états triplet (3) et singulet (1). La longueur de diffusion cohérente

$$a_{\text{eff}} = \frac{3}{4}\,a_t + \frac{1}{4}\,a_s$$

vaut $-1.9\,\text{fm}$, et l'indice de réfraction est plus grand que un : il ne peut pas y avoir de réflexion totale.

**4.** Prenant le carré de

$$\vec{I} = \vec{J} + \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}$$

soit

$$\vec{I}^2 = \vec{J}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\vec{\sigma}^2 + \hbar\vec{J}\cdot\vec{\sigma}$$

on obtient

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\hbar}\,\vec{J}\cdot\vec{\sigma} &= j \quad \text{si} \quad I = j + \frac{1}{2} \\
\frac{1}{\hbar}\,\vec{J}\cdot\vec{\sigma} &= -(j+1) \quad \text{si} \quad I = j - \frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

Les longueurs de diffusion sont donc données par

$$a_+ = a + bj \qquad\qquad a_- = a - b(j+1)$$

ou inversement

$$a = \frac{1}{2j+1}[(j+1)a_+ + ja_-] \qquad\qquad b = \frac{1}{2j+1}(a_+ - a_-)$$

**5.** L'amplitude $a$ correspond à une diffusion sans renversement du spin, et donc à une diffusion cohérente, et l'amplitude $b$ à une diffusion avec renversement du spin, et donc incohérente. Une autre manière de trouver le résultat est de remarquer que la probabilité de diffusion dans l'état $(j + 1/2)$ est $(j+1)/(2j+1)$ et $j/(2j+1)$ dans l'état $(j - 1/2)$. En utilisant les résultats de l'exercice 1.6.8,

$$
\begin{aligned}
\sigma_{\text{coh}} &= \frac{4\pi}{(2j+1)^2}\,[(j+1)a_+ + ja_-]^2 \\
\sigma_{\text{inc}} &= 4\pi\frac{j(j+1)}{(2j+1)^2}\,(a_+ - a_-)^2
\end{aligned}
$$

### 13.5.6 Section efficace d'absorption des neutrinos

**1.** L'élément de matrice $\langle\varphi_f|\varphi_i\rangle$ est donné par

$$\langle\varphi_f|\varphi_i\rangle = \frac{1}{\mathcal{V}^2}\int \mathrm{d}^3r\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{p}_1+\vec{p}_2+\vec{p}_3)\cdot\vec{r}/\hbar} = \frac{1}{\mathcal{V}}\delta_{\vec{p}_1+\vec{p}_2+\vec{p}_3,0}$$

où les $\vec{p}_i$ représentent les impulsions des trois particules finales. Le $\delta$ est un $\delta$ de Kronecker car nous avons utilisé des ondes planes dans une boîte. Prenant le carré

$$|\langle\varphi_f|\varphi_i\rangle|^2 = \frac{1}{\mathcal{V}^2}\,\delta_{\vec{p}_1+\vec{p}_2+\vec{p}_3,0}$$

Montrons que l'énergie cinétique de recul $K$ du proton est négligeable. La relation

$$\vec{P}+\vec{q}+\vec{p} = 0$$

montre que les trois impulsions sont *a priori* du même ordre de grandeur, $\sim p$. Mais, l'énergie cinétique de l'électron $k$

$$k \sim \frac{p^2}{2m_e} \gg K \sim \frac{p^2}{2m_p}$$

La densité d'états finaux est

$$\mathcal{D}(E) = \mathcal{V}^2\int \frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3}\,\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi\hbar)^3}\,\delta(K+E+cq-E_0)$$

Intégrons sur les angles

$$\begin{aligned}\mathcal{V}\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad &\to \quad \frac{4\pi\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3}\,p^2\mathrm{d}p = \frac{4\pi\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3}\,\frac{pE\mathrm{d}E}{c^2}\\ \mathcal{V}\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi\hbar)^3} \quad &\to \quad \frac{4\pi\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3}\,q^2\mathrm{d}q\end{aligned}$$

La conservation de l'énergie donne $q = (E-E_0)/c$ et en intégrant la densité de niveaux sur $q$

$$\mathcal{D}(E_0) = \frac{\mathcal{V}^2}{(2\pi^2)^2\hbar^6}\,\frac{pE}{c^2}\,\frac{(E-E_0)^2}{c^3}$$

Ceci donne pour le taux de désintégration par unité d'énergie $E$

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}E} = 2\pi\frac{G_F^2\langle|\mathcal{M}_{fi}|^2\rangle}{4\pi^4\hbar^7c^5}pE(E_0-E)^2$$

et en intégrant sur $E$ en négligeant la masse de l'électron, on obtient l'expression de la vie moyenne

$$\frac{1}{\tau} = \Gamma \sim \frac{G_F^2E_0^5}{60\pi^3\hbar(\hbar c)^6}$$

De l'expression

$$\frac{G_F^2}{(\hbar c)^6} = \frac{60\pi^3\hbar\Gamma}{E_0^5}$$

on déduit que $G_F^2/(\hbar c)^6$ a les dimensions d'une énergie à la puissance $-4$ et s'exprime, par exemple, en $\mathrm{MeV}^{-4}$. Pour l'estimation numérique, on convertit la vie moyenne en MeV

$$\frac{\hbar}{\tau} = \hbar\Gamma = 0.73 \times 10^{-24}\,\mathrm{MeV}$$

ce qui donne

$$\frac{G_F}{(\hbar c)^3} = 2.3 \times 10^{-11}\,\mathrm{MeV}^{-2} = 2.3 \times 10^{-5}\,\mathrm{GeV}^{-2}$$

en accord qualitatif avec la valeur exacte.

**2.** L'élément de matrice de la transition est

$$\langle\varphi_f|\varphi_i\rangle = \frac{1}{(\mathcal{V})^2}\int \mathrm{d}^3 r \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{p}_1+\vec{p}_2-\vec{p}\,'_1-\vec{p}\,'_2)\cdot\vec{r}/\hbar} = \frac{1}{\mathcal{V}}\,\delta_{\vec{p}_1+\vec{p}_2,\vec{p}\,'_1+\vec{p}\,'_2}$$

où $\vec{p}$ et $\vec{p}\,'$ représentent les impulsions des particules initiales et finales. La section efficace différentielle est

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{\mathcal{F}}\,\frac{2\pi}{\hbar}\,\langle|\mathcal{M}_{fi}|^2\rangle|\langle\varphi_f|\varphi_i\rangle|^2\mathcal{D}(E)$$

La densité d'états finaux est pour un électron relativiste d'énergie $E$ émis dans la direction $\Omega$

$$\mathcal{D}(E) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3}\,\frac{E^2}{c^3}$$

tandis que le flux est donné par $\mathcal{F} = c/\mathcal{V}$, puisque les neutrinos ont la vitesse de la lumière et que leur densité est $1/\mathcal{V}$. On trouve pour la section efficace

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{G_F^2}{4\pi^2}\,\frac{\langle|\mathcal{M}_{fi}|^2\rangle}{(\hbar c)^4}E^2$$

et en intégrant sur les angles, on obtient la section efficace totale d'absorption des neutrinos

$$\sigma_{\mathrm{tot}} = \frac{G_F^2}{\pi}\,\frac{\langle|\mathcal{M}_{fi}|^2\rangle}{(\hbar c)^4}E^2$$

En ordre de grandeur, dans un système d'unités où $\hbar = c = 1$, $1\,\mathrm{fm} = 1/(200\,\mathrm{MeV})$, $\sigma \sim G_F^2 E^2$, $G_F = 10^{-5}\,\mathrm{GeV}^{-2}$. Pour $E = 10\,\mathrm{MeV}$,

$$\sigma \sim 10^{-20}\,\mathrm{MeV}^{-2} = 4\times 10^{-16}\,\mathrm{fm}^2 = 4\times 10^{-46}\,\mathrm{m}^2$$

Prenant pour densité celle du fer, $n \simeq 10^{29}\,\mathrm{atomes/m}^{-3}$, on trouve pour le libre parcours moyen $\ell$

$$\ell = \frac{1}{30n\sigma} \sim 10^{15}\,\mathrm{m}$$

en tenant compte de ce qu'un atome de fer contient 30 neutrons. Le libre parcours moyen est donc environ 1/10 d'année lumière : détecter un neutrino est un exploit !

**3.** La section efficace inélastique maximale est

$$\sigma_{\mathrm{in,max}} = \frac{\pi}{k^2} \simeq \frac{\pi}{E^2}$$

On doit donc avoir

$$E \lesssim \frac{1}{\sqrt{G_F}} \simeq 300 \text{ GeV}$$

La théorie de Fermi est sûrement limitée à des énergies inférieures à 300 GeV.

### 13.6.7 Non hermiticité de $H_0$

On note que

$$H_0\psi_a^{(+)} = (H - V)\psi_a^{(+)} = (E_a - V)\psi_a^{(+)}$$

d'où l'on déduit

$$\Delta = (E_a - E_b)(\varphi_b, \psi_a^{(+)}) - (\varphi_b, V\psi_a^{(+)})$$

soit $\Delta = -T_{ba}$ si $E_a = E_b$. Si $E_a \neq E_b$,

$$\psi_a^{(+)} = \varphi_a + \frac{1}{E_a - H_0 + \mathrm{i}\eta} V\psi_a^{(+)}$$

et

$$(E_a - E_b)(\varphi_b, \psi_a^{(+)}) = \frac{E_a - E_b}{E_a - E_b + \mathrm{i}\eta}(\varphi_b, V\psi_a^{(+)}) = (\varphi_b, V\psi_a^{(+)})$$

ce qui implique $\Delta = 0$.

## 20.14 Exercices du chapitre 14

### 14.5.1 Particule $\Omega^-$ et couleur

Si l'on forme un spin 3/2 à partir de trois spins 1/2, le vecteur d'état est symétrique par rapport à l'échange de deux spins : par exemple, l'état $j = 3/2$, $j_z = 3/2$ est

$$\left|\frac{3}{2}, j_z = \frac{3}{2}\right\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$$

Si la fonction d'onde spatiale ne s'annule pas, elle est nécessairement symétrique. En effet, si elle était antisymétrique, par exemple dans l'échange des particules 1 et 2

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = -\varphi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_3)$$

elle annulerait au point $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$. Le vecteur d'état espace$\otimes$spin d'un système de trois quarks identiques doit être antisymétrique, et ceci est impossible si les trois quarks sont identiques. En fait, les quarks possèdent un nombre quantique supplémentaire, la couleur, et les trois quarks du $\Omega^-$ sont de couleurs différentes, la fonction d'onde de couleur étant antisymétrique.

### 14.5.2 Parité du méson $\pi$

**1.** Le système méson $\pi^-$-deutéron est analogue à un atome d'hydrogène, mis à part la masse réduite qui est différente

$$\mu = \frac{m_D m_\pi}{m_D + m_\pi} = 129\,\mathrm{MeV/c^2}$$

soit, pour les niveaux d'énergie

$$E_n = -\frac{\mu}{m_e}\frac{R_\infty}{n^2} = -253\,\frac{R_\infty}{n^2} = -\frac{3.42}{n^2}\,\mathrm{keV}$$

Les transitions se placent dans le domaine des rayons X, dont l'énergie varie entre $\sim 0.1$ et $\sim 100\,\mathrm{keV}$.

**2.** Le moment angulaire orbital étant nul, le moment angulaire total est celui du deutéron, $j = 1$. Les états finaux possibles de moment angulaire $j = 1$ sont ${}^3S_1$, ${}^3P_1$, ${}^1P_1$ et ${}^3D_1$, mais seul l'état ${}^3P_1$ est antisymétrique (espace+spin) dans l'échange des deux neutrons finaux. La parité de l'état final est $-1$ (moment angulaire orbital $L_{\text{fin}} = -1$) et celle de l'état initial est

$$\eta_\pi(-1)^{L_{\text{init}}} = \eta_\pi$$

L'égalité des parités initiale et finale implique $\eta_\pi = -1$.

### 14.5.4 Désintégration du positronium

**1.** Comme la masse réduite est $m_e/2$, les niveaux d'énergie sont de la forme

$$E_n = -\frac{1}{4}\,\frac{m_e^2 e^4}{\hbar^2}\,\frac{1}{n^2}$$

**2.** La composition des deux spins 1/2 donne, soit $j = 1$ (état triplet), soit $j = 0$ (état singulet).

**3.** Comme la projection suivant $z$ du moment angulaire orbital est nulle, la conservation du moment angulaire suivant cette direction s'écrit

$$m = m_1 + m_2$$

où $m$ est la projection sur $Oz$ du spin du positronium et $m_1$ et $m_2$ celles des deux photons. On peut envisager *a priori*

– deux photons droits : $m_1 = 1$ et $m_2 = -1$, $m_1 + m_2 = 0$
– deux photons gauches : $m_1 = -1$ et $m_2 = 1$, $m_1 + m_2 = 0$
– un photon gauche et un photon droit : $m_1 + m_2 = \pm 2$

Cette dernière éventualité est exclue car $m = -1$, 0 ou $+1$.

**4.** Dans une rotation de $\pi$ autour de $Oy$, les deux photons sont échangés. Comme il s'agit de deux bosons, le vecteur d'état global ne doit pas changer de signe dans cet échange. Avec $Y = \exp(-\mathrm{i}\pi J_y)$,

$$Y|jm\rangle = (-1)^{j-m}|j, -m\rangle$$

d'après (9.102). L'état initial change de signe si $j = 1$, car $m = 0$, et ne change pas de signe si $j = 0$. Seul l'état singulet de spin $j = 0$ peut se désintégrer en deux photons. De façon générale, *une particule de spin 1 ne peut pas se désintégrer en deux photons.*

**5.** La parité de l'état fondamental du positronium est

$$\Pi = \eta_{e^+}\eta_{e^-}(-1)^l = \eta_{e^+}\eta_{e^-}$$

où $l = 0$ est le moment angulaire orbital. Dans une réflexion par rappport au plan $xOz$, le vecteur d'état initial change de signe car l'opérateur $\mathcal{Y}$ qui effectue cette réflexion est $\mathcal{Y} = \Pi \exp(-\mathrm{i}\pi J_z)$. Pour les photons, d'après (9.104) et compte tenu de la parité impaire $\eta_\gamma = -1$ du photon

$$\mathcal{Y}|D\rangle = -|G\rangle \qquad \mathcal{Y}|G\rangle = -|D\rangle$$

Ceci montre que $|\Phi_+\rangle$ ne change pas de signe, tandis que $|\Phi_-\rangle$ change de signe. C'est donc l'état intriqué $|\Phi_-\rangle$ de deux photons qui est produit dans la désintégration.

### 14.5.7 Hiérarchie BBGKY et approximation de Hartree-Fock

**1.** Afin de simplifier les notations, nous utilisons un système d'unités où $\hbar = 1$. Comme l'opérateur nombre de particules est

$$\mathsf{N} = \int \mathrm{d}^3 z\, \psi^\dagger(\vec{z})\psi(\vec{z})$$

nous avons, en intégrant sur le volume $\mathcal{V}$

$$\int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^3 z\, \rho^{(1)}(\vec{z}, \vec{z}) = \langle \Phi_N|\mathsf{N}|\Phi_N\rangle = N$$

car $|\Phi_N\rangle$ est un état à $N$ particules. En insérant une relation de fermeture, nous obtenons l'expression de $\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y})$ en terme de fonctions d'onde

$$\begin{aligned}
\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}\,) &= \int \mathrm{d}^3 x_2 \cdots \mathrm{d}^3 x_N\, \langle \Phi_N|\psi^\dagger(\vec{y})|\vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N\rangle\langle \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N|\psi(\vec{x})|\Phi_N\rangle \\
&= N \int \mathrm{d}^3 x_2 \cdots \mathrm{d}^3 x_N\, \Phi_N^*(\vec{y}, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N)\Phi_N(\vec{x}, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N)
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé (14.60) et (14.61). Si $|\Phi_N\rangle$ est un état de $N$ fermions indépendants, $|\Phi_N\rangle = |n_1, \cdots, n_N\rangle$

$$\langle\Phi_N|\psi^\dagger(\vec{y})\psi(\vec{x})|\Phi_N\rangle = \sum_{i,j} u_j^*(\vec{y})u_i(\vec{x})\langle\Phi_N|c_j^\dagger c_i|\Phi_N\rangle = \sum_{i=1}^{N} u_i^*(\vec{y})u_i(\vec{x})$$

car $c_i^\dagger c_j \to \delta_{ij}$. En utilisant les équations d'évolution des opérateurs

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\partial_t\psi(\vec{x},t) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2 + U(\vec{x})\right]\psi(\vec{x},t) = \mathcal{H}_x\psi(\vec{x},t) \\ \mathrm{i}\partial_t\psi^\dagger(\vec{y},t) &= -\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_y^2 + U(\vec{y})\right]\psi^\dagger(\vec{y},t) = -\mathcal{H}_x\psi^\dagger(\vec{y},t) \end{aligned}$$

on obtient

$$\mathrm{i}\partial_t\rho^{(1)}(\vec{x},\vec{y};t) = \mathcal{H}_x\rho^{(1)}(\vec{x},\vec{y};t) - \mathcal{H}_y\rho^{(1)}(\vec{x},\vec{y};t)$$

ou formellement

$$\mathrm{i}\partial_t\rho^{(1)}(\vec{x},\vec{y};t) = [\mathcal{H}, \rho^{(1)}]$$

**2.** L'antisymétrie de $\rho^{(2)}$ vient de l'anticommutation des $\psi$. Calculons $\mathrm{Tr}_2\,\rho^{(2)}$

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}_2\,\rho^{(2)} &= \int \mathrm{d}^3z\,\langle\Phi_N|\psi^\dagger(\vec{y}_1)\psi^\dagger(\vec{z})\psi(\vec{z})\psi(\vec{x}_1)|\Phi_N\rangle \\ &= \langle\Phi_N|\psi^\dagger(\vec{y}_1)\mathsf{N}\psi(\vec{x}_1)|\Phi_N\rangle = (N-1)\rho^{(1)}(\vec{x}_1,\vec{y}_1) \end{aligned}$$

car $\psi(\vec{x}_1)|\Phi_N\rangle$ est un état à $(N-1)$ particules. En répétant le calcul de **1**, nous exprimons $\rho^{(2)}$ en terme de fonction d'onde

$$\begin{aligned} \rho^{(2)}(\vec{x},\vec{y};\vec{x},\vec{y}) = N(N-1)\int \mathrm{d}^3x_3\cdots\mathrm{d}^3x_N \\ \times\Phi_N^*(\vec{x},\vec{y},\vec{x}_3,\cdots,\vec{x}_N)\;\Phi_N(\vec{x},\vec{y},\vec{x}_3,\cdots,\vec{x}_N) \end{aligned}$$

$\rho^{(2)}(\vec{x},\vec{y};\vec{x},\vec{y})$ est la densité à deux particules ; c'est la fonction qui décrit les corrélations de densité : elle est proportionnelle à la probabilité jointe de trouver un fermion en $\vec{x}$ et un autre en $\vec{y}$. Dans le cas de fermions indépendants

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1,\vec{x}_2;\vec{y}_1,\vec{y}_2) = \sum_{ijkl} u_i^*(\vec{y}_1)u_j^*(\vec{y}_2)u_k(\vec{x}_1)u_l(\vec{x}_2)\langle\Phi_N|c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l|\Phi_N\rangle$$

mais entre états de la forme $|n_1,\cdots,n_N\rangle$ (voir (14.83))

$$c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l \to \delta_{il}\delta_{jk} - \delta_{ik}\delta_{kl}$$

et

$$\begin{aligned} \rho^{(2)}(\vec{x}_1,\vec{x}_2;\vec{y}_1,\vec{y}_2) &= \sum_{ij}\big[u_i^*(\vec{y}_1)u_j^*(\vec{y}_2)u_i(\vec{x}_1)u_j(\vec{x}_2) \\ &\quad -u_i^*(\vec{y}_1)u_j^*(\vec{y}_2)u_i(\vec{x}_2)u_j(\vec{x}_1)\big] \\ &= \rho^{(1)}(\vec{x}_1,\vec{y}_1)\rho^{(1)}(\vec{x}_2,\vec{y}_2) - \rho^{(1)}(\vec{x}_2,\vec{y}_1)\rho^{(1)}(\vec{x}_1,\vec{y}_2) \end{aligned}$$

**3.** Nous pouvons écrire la dépendance en $t$ de $\rho^{(1)}$ sous la forme

$$\rho^{(1)}(\vec{x},\vec{y};t) = \langle \Phi_N|\psi^\dagger(\vec{y},t)\psi(\vec{x},t)|\Phi_N\rangle$$

où $\psi(\vec{x},t)$ est l'opérateur de champ dans le point de vue de Heisenberg, qui vérifie

$$\mathrm{i}\partial_t\psi = [\psi, H]$$

Nous avons donc

$$\mathrm{i}\partial_t\rho^{(1)} = \langle \Phi_N|(\mathrm{i}\partial_t\psi^\dagger(\vec{y}))\psi(\vec{x},t)|\Phi_N\rangle + \langle \Phi_N|\psi^\dagger(\vec{y},t)(\mathrm{i}\partial_t\psi(\vec{x},t))|\Phi_N\rangle$$

Mais, compte tenu de (14.70) et (14.71)

$$\mathrm{i}\partial_t\psi(\vec{x},t) = \left[-\frac{1}{2m}\,\nabla_x^2 + U(\vec{x}\,)\right]\psi(\vec{x},t) + \int \mathrm{d}^3z\,\psi^\dagger(\vec{z})W(\vec{z},\vec{x})\psi(\vec{z})\psi(\vec{x})$$

on voit apparaître dans l'équation d'évolution de $\rho^{(1)}$ un terme

$$\begin{aligned}\langle \Phi_N|\psi^\dagger(\vec{y}_1)\int \mathrm{d}^3z\,\psi^\dagger(\vec{z})W(\vec{z},\vec{x})\psi(\vec{z})\psi(\vec{x}_1)|\Phi_N\rangle\\ = \int \mathrm{d}^3z\,W(\vec{z},\vec{x}_1)\rho^{(2)}(\vec{x}_1,\vec{z};\vec{y}_1,\vec{z})\end{aligned}$$

Ajoutant la contribution venant de $\mathrm{i}\partial_t\psi^\dagger$, on obtient pour la contribution de $\mathcal{W}$ à l'évolution

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t^{\mathcal{W}}\rho^{(1)} = \int \mathrm{d}^3z\,\left[W(\vec{z},\vec{x}_1) - W(\vec{z},\vec{y}_1)\right]\rho^{(2)}(\vec{x}_1,\vec{z};\vec{y}_1,\vec{z})$$

Par définition, l'élément de matrice $W_{ij;kl}$ du potentiel est donné par

$$W_{ij;kl} = \int \mathrm{d}^3x_1\,\mathrm{d}^3x_2\,\mathrm{d}^3y_1\,\mathrm{d}^3y_2\langle\vec{y}_1|u_i\rangle\langle\vec{y}_2|u_j\rangle\langle\vec{y}_1\vec{y}_2|\mathcal{W}|\vec{x}_1\vec{x}_2\rangle\langle\vec{x}_1|u_k\rangle\langle\vec{x}_2|u_l\rangle$$

Mais, par ailleurs,

$$W_{ij;kl} = \int \mathrm{d}^3x_1\,\mathrm{d}^3x_2\,u_i^*(\vec{x}_1)u_j(\vec{x}_2)W(\vec{x}_1,\vec{x}_2)u_k(\vec{x}_1)u_l(\vec{x}_2)$$

ce qui implique

$$\langle\vec{y}_1\vec{y}_2|\mathcal{W}|\vec{x}_1\vec{x}_2\rangle = W(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\delta^{(3)}(\vec{x}_1-\vec{y}_1)\delta^{(3)}(\vec{x}_2-\vec{y}_2)$$

Ceci nous permet d'écrire

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_2\left[\mathcal{W}\rho^{(2)}\right] &= \int \mathrm{d}^3z\,\mathrm{d}^3z_1\,\mathrm{d}^3z_2\,\langle\vec{x}_1,\vec{z}|\mathcal{W}|\vec{z}_1,\vec{z}_2\rangle\langle\vec{z}_1,\vec{z}_2|\rho^{(2)}|\vec{x}_1,\vec{z}\rangle\\ &= \int \mathrm{d}^3z\,W(\vec{x}_1,\vec{z})\rho^{(2)}(\vec{x}_1,\vec{z};\vec{y}_1,\vec{z})\end{aligned}$$

Compte tenu du résultat de la question **1**, on en déduit l'équation d'évolution complète

$$i\hbar\partial_t \rho^{(1)} = [h_1, \rho^{(1)}] + \mathrm{Tr}_2\left([\mathcal{W}, \rho^{(2)}]\right)$$

**4.** *Approximation de Hartree.* L'équation(14.134) est un conséquence immédiate de l'approximation (14.132) et de l'équation d'évolution de $\rho^{(1)}$.

**5.** *Approximation de Hartree-Fock.* La forme approché de $\rho^{(2)}$ est

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{y}_1, \vec{y}_2) = \sum_{ij}\left[u_i^*(\vec{y}_1)u_j^*(\vec{y}_2)u_j(\vec{x}_2)u_i(\vec{x}_1) - u_i^*(\vec{y}_1)u_j^*(\vec{y}_2)u_i(\vec{x}_2)u_j(\vec{x}_1)\right]$$

La trace du premier terme donne $N\rho^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{y}_1)$, et celle du second

$$-\sum_{ij}\int \mathrm{d}^3x_2\, u_i^*(\vec{y}_1)u_j^*(\vec{x}_2)u_i(\vec{x}_2)u_j(\vec{x}_1) = -\sum_i u_i^*(\vec{y}_1)u_i(\vec{x}_1) = -\rho^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{y}_1)$$

et on a donc bien

$$\mathrm{Tr}_2\rho^{(2)} = (N-1)\rho^{(1)}$$

## 20.15 Exercices du chapitre 15

### 15.4.1 Perturbation au second ordre et forces de van der Waals

**1.** Partons de l'équation aux valeurs propres à l'ordre $\lambda^2$

$$\begin{aligned} H(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle &= (H_0 + \lambda W)|\varphi(\lambda)\rangle \\ &= (E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2)|\varphi(\lambda)\rangle \end{aligned}$$

avec

$$|\varphi(\lambda)\rangle = |\varphi_0\rangle + \lambda|\varphi_1\rangle + \lambda^2|\varphi_2\rangle$$

et la condition auxiliaire $\langle\varphi_0|\varphi(\lambda)\rangle = 1$ d'où

$$\langle\varphi_0|\varphi_1\rangle = -\lambda\langle\varphi_0|\varphi_2\rangle$$

De ces équations, on déduit à l'ordre $\lambda^2$

$$(H_0 - E_0)|\varphi_2\rangle = (E_1 - W)|\varphi_1\rangle + E_2|\varphi_0\rangle$$

En multipliant à gauche par le bra $\langle\varphi_0|$ et en tenant compte de ce que $\langle\varphi_0|\varphi_1\rangle$ est d'ordre $\lambda$

$$E_2 = \langle\varphi_0|W|\varphi_1\rangle \tag{20.1}$$

De plus, l'identification des termes d'ordre $\lambda$ pour $|\varphi(\lambda)\rangle$ donne

$$(H_0 - E_0)|\varphi_1\rangle = (E_1 - W)|\varphi_0\rangle \tag{20.2}$$

Écrivons l'opérateur identité sous la forme ($|\varphi_0\rangle \equiv |n\rangle$)

$$I = |n\rangle\langle n| + (H_0 - E_0)^{-1}\Big(\sum_{k\neq n} |k\rangle\langle k|\Big)(H_0 - E_0)$$

et utilisons l'expression (20.1) de $E_2$

$$E_2 = \langle n|W|n\rangle\langle n|\varphi_1\rangle + \sum_{k\neq n}\langle n|W\,\frac{1}{H_0 - E_0}|k\rangle\langle k|(H_0 - E_0)|\varphi_1\rangle$$

Négligeant le premier terme car $\langle n|\varphi_1\rangle = O(\lambda)$ et utilisant (20.2)

$$E_2 = \sum_{k\neq n}\frac{|\langle n|W|k\rangle|^2}{E_0 - E_k}$$

**2.** Un moment dipolaire $\vec{d} = q_e\vec{r}_1$ situé en $\vec{R} = 0$ crée au point $\vec{R}$ un champ électrique

$$\vec{E} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0 R^3}\left[\vec{d} - 3(\vec{d}\cdot\hat{R})\hat{R}\right]$$

et l'énergie potentielle de l'ensemble des deux atomes est

$$W = -q_e\vec{r}_2\cdot\vec{E}$$

**3.** $\langle\varphi_{01}\varphi_{02}|W|\varphi_{01}\varphi_{02}\rangle = 0$ parce que les valeurs moyennes de $X_1$, $Y_1$ et $Z_1$ sont nulles par parité

$$\langle\varphi_{01}|X_1|\varphi_{01}\rangle = 0$$

et de même pour les valeurs moyennes de $X_2$, $Y_2$ et $Z_2$.

**3.** En utilisant la relation de fermeture

$$\sum_\alpha |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha| = I$$

on obtient

$$E_2 \simeq -\frac{1}{2R_\infty}\,\langle\varphi_{01}\varphi_{02}|W^2|\varphi_{01}\varphi_{02}\rangle$$

Les seuls termes de $W^2$ dont la valeur moyenne est non nulle sont $X_1^2X_2^2$, $Y_1^2Y_2^2$ et $4Z_1^2Z_2^2$. En utilisant l'invariance par rotation

$$\langle\varphi_{01}|X_1^2|\varphi_{01}\rangle = \frac{1}{3}\,\langle\varphi_0|\vec{R}^2|\varphi_0\rangle = \frac{1}{3}\,\langle R^2\rangle = a_0^2$$

Le temps caractéristique d'une fluctuation du moment dipolaire d'un des atomes est $\tau \simeq \hbar/R_\infty$. Pour qu'un calcul statique tel que celui exposé ci-dessus soit valable, il faut pouvoir négliger le temps de propagation de la lumière entre les deux atomes, et il faut donc que $R \ll c\tau = \hbar c/R_\infty$.

### 15.4.2 Atomes muoniques

**1.** La masse réduite du problème est

$$m'_\mu = \frac{m_\mu}{1 + m_\mu/m_A} \simeq \frac{m_\mu/m_e}{1 + m_\mu/(Am_p)}$$

soit

$$m'_\mu = \alpha(A)m_e \qquad \alpha(A) = \frac{m_\mu/m_e}{1 + m_\mu/(Am_p)}$$

Applications

- Aluminium : $a_\mu^{Z=13} = 19.8\,\mathrm{fm} \qquad R = 3.6\,\mathrm{fm}$
- Plomb : $a_\mu^{Z=82} = 3.1\,\mathrm{fm} \qquad R = 7.1\,\mathrm{fm}$

**2.** Effet des électrons des couches internes. La fonction d'onde des électrons les plus internes est

$$\varphi_0^Z(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi(a_e^Z)^3}}\,\mathrm{e}^{-r/a_e^Z} \qquad a_e^Z = \frac{a_0}{Z}$$

La charge électronique dans une orbite de rayon $a_\mu^Z$ est

$$Q \simeq 2q_e\left(\frac{a_\mu^Z}{a_e^Z}\right)^3 \simeq 2q_e\left(\frac{m_e}{m_\mu}\right)^3 \sim q_e \times 10^{-6}$$

L'énergie de la transition $2p \to 1s$ de l'atome d'hydrogène est $\Delta E_H \simeq (3/4)R_\infty$. Elle vaut pour un atome muonique dans le cas de l'aluminium

$$\Delta E_\mu^{\mathrm{Al}} = (13)^2\alpha(27)\frac{3}{4}\,R_\infty = 354.9\,\mathrm{keV}$$

et dans le cas du plomb

$$\Delta E_\mu^{\mathrm{Pb}} = (82)^2\alpha(208)\frac{3}{4}\,R_\infty = 14.2\,\mathrm{MeV}$$

L'approximation d'un noyau ponctuel n'est évidemment pas valable pour le plomb, car le rayon de l'orbite est environ la moitié du rayon nucléaire ! Cette approximation ne peut même pas servir d'approximation d'ordre zéro. Il serait préférable de partir d'une approximation d'oscillateur harmonique en utilisant le potentiel de la question suivante.

**3.** Le potentiel à utiliser dans le calcul perturbatif pour $r < R$ est

$$W(r) = \frac{Ze^2}{2}\left[\frac{1}{R}\left(\frac{r}{R}\right)^2 - 3 + \frac{2}{r}\right]$$

Le potentiel $W$ étant non nul uniquement pour $r < R$, la contribution d'un état dont la fonction d'onde s'annule à $r = 0$ (onde $p$, onde $d$, etc.) est négligeable. Pour une onde $ns$, on utilise

$$\int \mathrm{d}^3r\,W(r)|\varphi_{ns}(\vec{r})|^2 \simeq |\varphi_{ns}(0)|^2 \int \mathrm{d}^3r\,W(r)$$

Compte tenu de

$$\int \mathrm{d}^3r\, W(r) = \frac{2\pi}{5}\, Ze^2R^2$$

on trouve

$$\delta E_{ns} = \frac{2\pi}{5}\, Ze^2R^2|\varphi_{ns}(0)|^2$$

ce qui donne numériquement pour la transition $2p \to 1s$

$$\delta E_{1s} = \frac{2Ze^2}{5a_\mu^Z}\left(\frac{R}{a_\mu^Z}\right)^2 = \frac{4}{5}\, R_\infty Z^2\left(\frac{m_\mu}{m_e}\right)\left(\frac{R}{a_\mu^Z}\right)^2 = 12.6\,\mathrm{keV}$$

En tenant compte de la polarisation du vide

$$\Delta E_{2p\to 1s} = 354.9 - 12.6 + 2.2 = 344.5\,\mathrm{keV}$$

en excellent accord avec le résultat expérimental.

**4.** Le rapport de l'énergie de la structure fine à celle du fondamental est la même pour les atomes ordinaires et muoniques : elle est proportionnelle dans les deux cas à $\alpha^2$. En revanche, le rapport de l'énergie de structure hyperfine à celle de l'état fondamental est plus grande par un facteur $\sim m_\mu/m_e$ pour les atomes muoniques. En effet, si l'on examine (15.32) en tenant compte de ce que l'énergie du fondamental est en $1/a$, on doit tenir compte d'un facteur $1/a^3 \sim (m_\mu/m_e)^3$ et d'un facteur $m_e/m_\mu$ venant de la comparaison des moments magnétiques de l'électron et du muon.

### 15.4.4 Atomes de Rydberg

**1.** Dans le cas $l = n-1$, le développement de $u_{nl}(r)$ se réduit à un seul terme

$$u_{nl}(r)\Big|_{l=n-1} = c_0\left(\frac{r}{a_0}\right)^n \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right)$$

Posons $x = r/a_0$ et étudions la fonction $f(x) = x^n\exp(-x/n)$, ou de façon équivalente son logarithme $g(x)$. La fonction $f(x)$ présente un maximun aigu au voisinage d'un point $x_0$ que l'on détermine en étudiant $g'(x)$, $g'(x_0) = 0$

$$g'(x) = \frac{n}{x} - \frac{1}{n} \qquad x_0 = n^2$$

Calculons aussi la dérivée seconde

$$g''(x) = -\frac{n}{x^2} \qquad g''(x_0) = -\frac{1}{n^3}$$

et donc

$$f(x) \simeq f(x_0)\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2n^3}\right)$$

La dispersion autour du maximum à $x_0$ est $\Delta x = n^{3/2}$. Lorsque $l = n-1$, la fonction d'onde radiale est localisée autour d'une valeur $a_0 n^2$ avec une dispersion $a_0 n^{3/2}$. Lorsque $l \neq n-1$, l'exponentielle dans $u_{nl}(r)$ est multipliée par un polynôme en $r$, et non un simple monôme, ce qui élargit la courbe.

**2.** Au voisinage de $\theta = \pi/2$ et en posant $\delta = \pi/2 - \theta$

$$\sin^l \theta = \cos^l \delta \simeq \left(1 - \frac{1}{2}\,\delta^2\right)^l \simeq \exp\left(-\frac{1}{2} l \delta^2\right)$$

La fonction d'onde est donc concentrée dans une ouverture angulaire $\delta\theta \simeq 1/\sqrt{l} \simeq 1/\sqrt{n}$, ce qui lui donne une dispersion suivant $Oz$

$$\Delta z \simeq \frac{1}{\sqrt{n}} a_0 n^2 = a_0 n^{3/2}$$

Les dispersions horizontale (question **1**) et verticale (question **2**) étant toutes deux en $a_0 n^{3/2}$, l'orbite est donc bien un tore de rayon $a_0 n^{3/2}$ autour d'un cercle de rayon $a_0 n^2$.

# 20.16 Exercices du chapitre 16

## 16.4.3 Structure hyperfine du deutérium

**1.** La contribution d'un proton au moment magnétique comprend sa partie orbitale $\gamma_l \vec{L}$ et sa partie de spin $\gamma_s \vec{S}$. Il n'y a pas de partie orbitale pour le neutron qui est de charge nulle.

**3.** On calcule la valeur moyenne du moment magnétique dans l'état $|++\rangle$

$$\begin{aligned}
\mu_D &= \langle ++|\gamma_p S_{pz} + \gamma_n S_{nz}|++\rangle = \frac{1}{2}\,\hbar\gamma_p + \frac{1}{2}\,\hbar\gamma_n \\
&= (5.59 - 3.83)\frac{q_p \hbar}{4m_p} = \frac{1}{2}(5.59 - 3.83)\mu_N = 0.88\,\mu_N
\end{aligned}$$

En utilisant $\vec{S}_n = \vec{S}_D - \vec{S}_p \Longrightarrow \langle \vec{S}_D \cdot \vec{S}_p\rangle = \hbar^2$ et le théorème de Wigner-Eckart, on montre que dans l'état ${}^3S_1$

$$\langle \vec{S}_p\rangle = \langle \vec{S}_n\rangle = \frac{1}{2}\,\langle \vec{S}_D\rangle$$

**2.** L'interaction effective dans l'état $1s$ est

$$W_D = -\frac{2\mu_0}{3}\,\gamma_D \gamma_e |\varphi(0)|^2 \vec{S}_D \cdot \vec{S}_e$$

tandis que pour l'hydrogène (voir (15.32))

$$W_D = -\frac{2\mu_0}{3}\,\gamma_p \gamma_e |\varphi(0)|^2 \vec{S}_p \cdot \vec{S}_e$$

On a donc

$$A_D = \frac{\gamma_D}{\gamma_p}\, A_H = \frac{0.88}{5.59}\, A_H = 0.92 \times 10^{-6}\,\text{eV}$$

**5. N.B. :** $F$, $S_p$ et $S_D$ sont des nombres, alors que $\vec{S}$ a les dimensions de $\hbar$.

$$\vec{F} = \vec{S}_D + \vec{S}_e \Longrightarrow F(F+1) = S_D(S_D+1) + S_e(S_e+1) + 2\vec{S}_D \cdot \vec{S}_e/\hbar^2$$

soit

$$\vec{S}_D \cdot \vec{S}_e = \frac{\hbar^2}{2}\,[F(F+1) - S_D(S_D+1) - S_e(S_e+1)]$$

ceci donne, pour les deux valeurs possible de $F$

$$\begin{aligned} F &= \frac{3}{2} \qquad F(F+1) = \frac{15}{4} \qquad \vec{S}_D \cdot \vec{S}_e = \frac{\hbar^2}{2} \\ F &= \frac{1}{2} \qquad F(F+1) = \frac{3}{4} \qquad \vec{S}_D \cdot \vec{S}_e = -\hbar^2 \end{aligned}$$

**6.** L'interaction Zeeman est

$$W = -\frac{q_e}{2m_e}\, 2\vec{S}_e \cdot \vec{B} = -\frac{q_e B}{m_e}\, S_{ez}$$

tandis que d'après le théorème de Wigner-Eckart,

$$\langle F m'_F | S_{ez} | F m_F \rangle = \frac{m_F}{\hbar F(F+1)} \langle \vec{S}_e \cdot \vec{F} \rangle \delta_{m_F, m'_F}$$

Mais l'on a également

$$S_D^2 = 2 = (\vec{F} - \vec{S}_e)^2 = F(F+1) + \frac{3}{4} - 2\vec{F} \cdot \vec{S}_e/\hbar^2$$

soit

$$\langle \vec{F} \cdot \vec{S}_e \rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left[F(F+1) + \frac{3}{4} - 2\right] = \frac{\hbar^2}{2}\left[F(F+1) - \frac{5}{4}\right]$$

On en déduit les niveaux Zeeman

$$W_{m'_F m_F} = -\frac{q_e B}{m_e}\, \frac{m_F \hbar}{F(F+1)} \frac{1}{2}\left[F(F+1) - \frac{5}{4}\right]$$

Les niveaux d'énergie sont donnés correctement par cette formule pourvu que $W$ puisse être traité comme une perturbation : $|W| \ll A_D$.

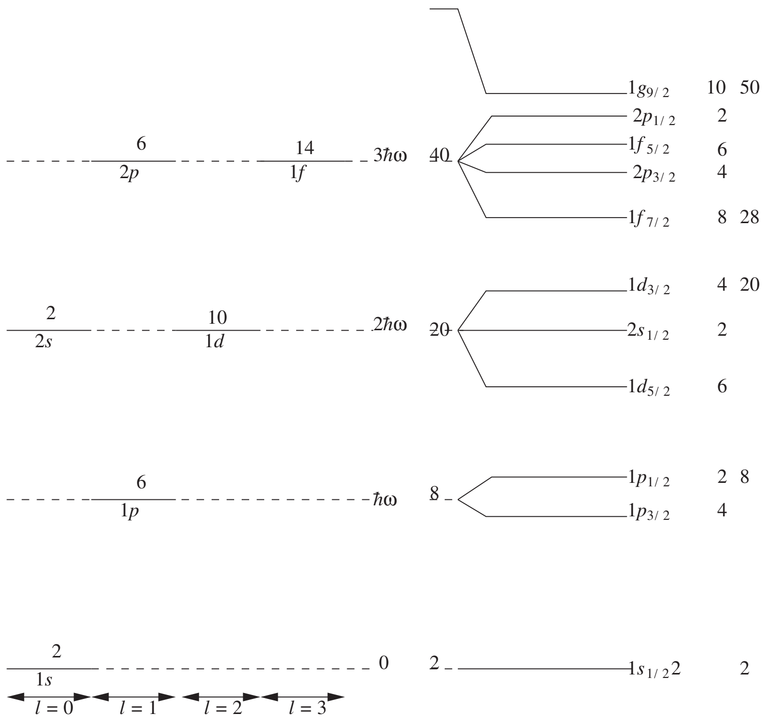



Fig. 20.2 – Les premiers niveaux du modèle en couches du noyau. Le remplissage maximum des divers niveaux est explicité.

## 16.4.4 Modèle en couches du noyau atomique

**1.** et **2.** Voir la figure 20.2.

**3.** Le proton du tritium est dans un état $1s^{1/2}$. Le noyau a donc un spin 1/2 et son moment magnétique vaut

$$\mu = \left\langle \frac{1}{2}\,\frac{1}{2}|\gamma_p S_{pz}|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{2}\,\hbar\gamma_p = \frac{1}{2}\,5.59\mu_N = 2.79\mu_N$$

Dans le cas de $^3$H, c'est le neutron qui est dans un état $1s^{1/2}$. Ce noyau a donc aussi un spin 1/2 et

$$\mu = \frac{1}{2}\,\hbar\gamma_n = \frac{1}{2}\,(-3.83)\mu_N = -1.91\mu_N$$

Ces deux résultats sont en accord avec l'expérience à 10 % près.

**4.** Les nucléons externes sont

1. $^7$Li un proton $p_{3/2}$ : $J = \frac{3}{2}$
2. $^9$Be un neutron $p_{3/2}$ : $J = \frac{3}{2}$

3. $^{13}$C un neutron $p_{1/2}$ : $J = \frac{1}{2}$
4. $^{17}$O un neutron $d_{5/2}$ : $J = \frac{5}{2}$
5. $^{41}$K un proton $d_{3/2}$ : $J = \frac{3}{2}$
6. $^{43}$Ca un neutron $f_{7/2}$ : $J = \frac{7}{2}$

**5.** On doit distinguer les cas $j = l+1/2$ et $j = l-1/2$. D'après le théorème de Wigner-Eckart,

$$\langle jm|L_z|jm\rangle\Big|_{m=j} = \frac{j}{j(j+1)}\langle \vec{J}\cdot\vec{L}\rangle = \frac{1}{j+1}\langle \vec{J}\cdot\vec{L}\rangle$$

Les valeurs moyennes de $\langle \vec{J}\cdot\vec{L}\rangle$ sont données par

$$\begin{aligned} j &= l+\frac{1}{2} \qquad \langle \vec{J}\cdot\vec{L}\rangle = \frac{1}{2}(j+1)(2j-1) \\ j &= l-\frac{1}{2} \qquad \langle \vec{J}\cdot\vec{L}\rangle = j\left(j+\frac{3}{2}\right) \end{aligned}$$

et celles de $\langle \vec{J}\cdot\vec{S}\rangle$ par

$$\begin{aligned} j &= l+\frac{1}{2} \qquad \langle \vec{J}\cdot\vec{S}\rangle = \frac{1}{2}(j+1) \\ j &= l-\frac{1}{2} \qquad \langle \vec{J}\cdot\vec{S}\rangle = -\frac{1}{2}\,j \end{aligned}$$

On en déduit, pour les noyaux $j = l+1/2$

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{\hbar}{2(j+1)}\left[(j+1)(2j-1)\gamma_l + (j+1)\gamma_p\right] \\ &= \gamma_l\hbar\left(j-\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\,\gamma_s\hbar \end{aligned}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} {}^{7}\text{Li} : \mu &= 3.79\mu_N \quad {}^{9}\text{Be} : \mu = -1.91\mu_N \\ {}^{17}\text{O} : \mu &= -1.91\mu_N \; {}^{43}\text{Ca} : \mu = -1.91\mu_N \end{aligned}$$

Pour les noyaux $j = l-1/2$,

$$\mu = \frac{j\hbar}{j+1}\left[\left(j+\frac{3}{2}\right) - \frac{1}{2}\,\gamma_s\right]$$

ce qui donne

$$^{13}\text{C} : \mu = 0.64\mu_N \qquad ^{41}\text{K} : \mu = 0.12\mu_N$$

L'accord avec l'expérience est seulement qualitatif, même si l'allure générale des résultats, et en particulier le signe de $\mu$, sont corrects.

# 20.17 Exercices du chapitre 17

## 17.5.4 Détection homodyne et lame séparatrice déséquilibrée

**1.** On part de l'action d'une lame séparatrice donnée par (17.67) pour $\cos\lambda = \sin\lambda = 1/\sqrt{2}$

$$\begin{aligned} U\,a^\dagger\,U^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^\dagger + \mathrm{i}b^\dagger\right) \\ U\,b^\dagger\,U^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{i}a^\dagger + b^\dagger\right) \end{aligned}$$

Examinons l'action de la première lame en partant de l'état initial

$$|\Psi_0\rangle = |1_a 0_b\rangle = a^\dagger|0_a 0_b\rangle$$

Dans le point de vue de Schrödinger, l'action de la lame sur le vecteur d'état est donnée par

$$|\Psi_1\rangle = U|\Psi_0\rangle = Ua^\dagger|0_a 0_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_a 0_b\rangle + \mathrm{i}|0_a 1_b\rangle)$$

Le trajet supérieur de l'interféromètre ajoute un facteur de phase $\exp(\mathrm{i}\delta)$

$$|\Psi_1'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta}|1_a 0_b\rangle + \mathrm{i}|0_a 1_b\rangle)$$

tandis que l'action de la seconde lame se traduit par

$$|\Psi_2\rangle = U|\Psi_1'\rangle = \frac{1}{2}\left[\left(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta} - 1\right)|1_a 0_b\rangle + \mathrm{i}\left(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta} + 1\right)|0_a 1_b\rangle\right]$$

Ceci donne immédiatement

$$\langle\Psi_2|a^\dagger a|\Psi_2\rangle = \frac{1}{2}(1 - \cos\delta)$$

Pour un état de Fock à $n$ photons, on part de

$$|\Psi_0\rangle = |n_a 0_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n|0_a 0_b\rangle$$

Nous avons la suite des transformations

$$\begin{aligned} a^\dagger &\to \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^\dagger + \mathrm{i}b^\dagger\right) \to \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta}a^\dagger + \mathrm{i}b^\dagger\right) \\ &\to \frac{1}{2}\left[\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta}(a^\dagger + \mathrm{i}b^\dagger) + \mathrm{i}(\mathrm{i}a^\dagger + b^\dagger\right] \\ &= \frac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta} - 1\right)a^\dagger + \frac{\mathrm{i}}{2}\left(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta} + 1\right)b^\dagger \end{aligned}$$

et l'état final est donc

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left[\frac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta}-1\right)a^\dagger + \frac{\mathrm{i}}{2}\left(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta}+1\right)b^\dagger\right]^n |0_a 0_b\rangle$$

L'interféromètre envoie les photons suivant une loi binômiale dans chacun des deux bras avec une probabilité $(1-\cos\delta)/2$ et $(1+\cos\delta)/2$ respectivement, et les taux de comptage sont proportionnels à $n(1-\cos\delta)/2$ et $n(1+\cos\delta)/2$ : le résultat est le même que pour $n$ photons individuels successifs.

Pour un état cohérent, d'après (17.69)

$$|\Psi_1'\rangle = D_a\left(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta} z/\sqrt{2}\right) D_b\left(\mathrm{i}z/\sqrt{2}\right)|0_a 0_b\rangle = D_a(z_a)D_b(z_b)|0_a 0_b\rangle$$

Toujours d'après (17.69),

$$\begin{aligned} U D_a(z_a) U^\dagger &= D_a\left(z_a/\sqrt{2}\right) D_b\left(\mathrm{i}z_a/\sqrt{2}\right) \\ U D_b(z_b) U^\dagger &= D_a\left(\mathrm{i}z_b/\sqrt{2}\right) D_b\left(z_b/\sqrt{2}\right) \end{aligned}$$

On obtient pour $|\Psi_2\rangle$ en utilisant (10.42)

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\Phi} D_a\left(\frac{z_a+\mathrm{i}z_b}{\sqrt{2}}\right) D_b\left(\frac{\mathrm{i}z_a+z_b}{\sqrt{2}}\right)|0_a 0_b\rangle \\ &= \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\Phi}\Big|\frac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta}-1\right)z \otimes \frac{\mathrm{i}}{2}\left(\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\delta}+1\right)z\Big\rangle \end{aligned}$$

d'où l'on déduit

$$\langle\Psi_2|a^\dagger a|\Psi\rangle = \frac{1}{2}(1-\cos\delta)$$

soit le même résultat que pour un photon unique.

**2.** Dans cette question, il est commode de choisir le point de vue de Heisenberg, où les vecteurs d'état et les opérateurs statistiques sont indépendants du temps, et où les opérateurs subissent la tranformation (17.66). Le taux de détection est donné par la valeur moyenne de $c^\dagger c$, où $c$ est l'opérateur transformé de $a$

$$\begin{aligned} w_a &\propto \mathrm{Tr}\left[\rho_s|z\rangle\langle z|c^\dagger c\right] = \mathrm{Tr}\left[\rho_s|z\rangle\langle z|\left(a^\dagger\cos\lambda - \mathrm{i}b^\dagger\sin\lambda\right)\left(a\cos\lambda+\mathrm{i}b\sin\lambda\right)\right] \\ &= \mathrm{Tr}\left[\rho_s a^\dagger a\right]\cos^2\lambda + \langle z|b^\dagger b|z\rangle\sin^2\lambda + \mathrm{i}\,\mathrm{Tr}\left[\rho_s|z\rangle\langle z|\left(a^\dagger b - b^\dagger a\right)\right]\sin\lambda\cos\lambda \end{aligned}$$

Le terme $\mathrm{Tr}[\rho_s a^\dagger a]$ donne le nombre moyen de photons du signal, $\langle z|b^\dagger b|z\rangle = |z|^2$ le nombre moyen de photons de l'oscillateur local et le dernier terme mélange le signal et l'oscillateur local. Compte tenu de $\langle z|b|z\rangle = z$

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\,\mathrm{Tr}\left[\rho_s|z\rangle\langle z|\left(a^\dagger b - b^\dagger a\right)\right] &= \mathrm{i}z\mathrm{Tr}(\rho_s a^\dagger) - \mathrm{i}z^*\mathrm{Tr}(\rho_s a) \\ &= \mathrm{i}|z|\mathrm{Tr}\left[\rho_s\left(a^\dagger\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta} - a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}\right)\right] \\ &= 2|z|\mathrm{Tr}\left[\rho_s X_{[\theta+\pi/2]}\right] = 2|z|\langle X_{[\theta+\pi/2]}\rangle \end{aligned}$$

en utilisant (17.72). On retrouve la formule de l'énoncé en remarquant que

$$\sin\lambda\cos\lambda = \sqrt{t(1-t)}$$

En faisant varier la phase $\theta$ de l'oscillateur local, on peut donc mesurer n'importe quel opérateur de quadrature.

### 17.5.5 Oscillations de Rabi dans une cavité

**1.** Compte tenu de (17.93), le vecteur d'état au temps $t = 0$ pour $n$ photons dans la cavité est

$$|\psi_n(0)\rangle = |\varphi_n^e\rangle = \cos\theta_n|\chi_n^-\rangle + \sin\theta_n|\chi_n^+\rangle$$

et donc

$$\langle\varphi_n^e|\psi_n(t)\rangle = \cos^2\theta_n\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\Omega_n t/2} + \sin^2\theta_n\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega_n t/2}$$

avec

$$\Omega_n = \sqrt{\delta^2 + (n+1)\Omega_R^2}$$

Compte tenu de $\tan 2\theta_n = \Omega_R\sqrt{n+1}/\delta$, on trouve

$$\mathsf{p}(t) = 1 - \frac{(n+1)\Omega_R^2}{\delta^2 + (n+1)\Omega_R^2}\sin^2\frac{\Omega_n^2 t}{2}$$

ce que l'on aurait pu déduire directement de (5.43), car $\Omega_n$ est la fréquence des oscillations de Rabi. La figure 5.8 montre la réduction des oscillations hors résonance.

**2.** À la résonance, et pour $n$ photons dans la cavité

$$|\psi_n(t)\rangle = \cos\frac{\Omega_n t}{2}\,|\varphi_n^e\rangle - \mathrm{i}\,\sin\frac{\Omega_n t}{2}\,|\varphi_n^g\rangle$$

et pour un état cohérent initial $|z\rangle$,

$$|\psi_z(t)\rangle = \mathrm{e}^{-|z|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|\psi_n(t)\rangle$$

L'amplitude $a_n(t)$ pour observer un état final $|e\otimes n\rangle$ est donc

$$a_n(t) = \mathrm{e}^{-|z|^2/2}\,\frac{z^n}{\sqrt{n!}}\,\cos\frac{\Omega_n t}{2}$$

Lorsque l'on a détecté l'atome dans l'état $|e\rangle$, on observe que les états $|e\otimes n\rangle$ sont des états finaux *différents*, qui pourraient, au moins en théorie, être

distingués. Il faut donc sommer les *probabilités* de trouver l'atome dans l'état $|e \otimes n\rangle$

$$\mathsf{p}_n(t) = |a_n(t)|^2 = \mathrm{e}^{-|z|^2}\,\frac{|z|^{2n}}{n!}\,\cos^2\frac{\Omega_n t}{2}$$

et la probabilité de trouver l'atome dans l'état excité est

$$\mathsf{p}(t) = \sum_{n=0}^{\infty}\mathsf{p}_n(t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\,\mathrm{e}^{-|z|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{|z|^{2n}}{n!}\,\cos(\Omega_n t)$$

La transformée de Fourier de $\mathsf{p}(t)$ doit exhiber des pics à $\Omega_0 = \Omega_R$, $\Omega_1 = \sqrt{2}\,\Omega_R$, $\Omega_3 = \sqrt{3}\,\Omega_R \cdots$ $|z|^2 \simeq 0.9$ est le nombre moyen de photons.

**3.** Pour $|z| \gg 1$, la fonction

$$\mathsf{p}_n = \mathrm{e}^{-|z|^2}\,\frac{|z|^{2n}}{n!}$$

passe par un maximum pour $n \simeq n_0 = |z|^2$ et elle est approchée par une gaussienne

$$\mathsf{p}_n \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi n_0}}\exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2n_0}\right)$$

Posons $u = n - n_0 \ll n_0$

$$\Omega_n = \Omega_{n_0+u} \simeq \Omega_R\sqrt{n_0}\left(1 + \frac{u}{n_0}\right)$$

de sorte que, en remplaçant la somme discrète par une intégrale

$$\mathsf{p}(t) \simeq \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\,\frac{1}{\sqrt{2\pi n_0}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-u^2/2n_0}\,\cos\left[\left(\Omega_{n_0} + \frac{\Omega_R u}{2\sqrt{n_0}}\right)t\right]$$

Compte tenu de

$$\cos\left[\left(\Omega_{n_0} + \frac{\Omega_R u}{2\sqrt{n_0}}\right)t\right] = \cos(\Omega_{n_0}t)\cos\frac{\Omega_R ut}{2\sqrt{n_0}} - \sin(\Omega_{n_0}t)\sin\frac{\Omega_R ut}{2\sqrt{n_0}}$$

et de ce que le deuxième terme ne contribue pas à l'intégrale, on obtient

$$\begin{aligned}\mathsf{p}(t) &\simeq \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\,\cos(\Omega_{n_0}t)\exp\left(-\frac{\Omega_R^2 t^2}{8}\right)\\ &\simeq \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\,\cos(\Omega_{n_0}t)\exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)\end{aligned}$$

avec $\tau = 2\sqrt{2}/\Omega_R$. L'approximation de $n$ par une variable continue reproduit bien la décroissance initiale des oscillations. Cependant, si l'on écrit

$$\Omega_n \simeq \Omega_{n_0} + \frac{\Omega_R(n-n_0)}{2\sqrt{n_0}}$$

on voit que toutes les oscillations sont en phase pour un temps $t$ tel que

$$t = \frac{4\pi\sqrt{n_0}}{\Omega_R} = \left(\pi\sqrt{2n_0}\right)\,\tau \gg \tau$$

On aura donc une résurgence de oscillations pour cette valeur de $t$.

### 17.5.6 Effet Casimir

**1.** Les seuls paramètres physiques à notre disposition sont $L$, $\hbar$ (il s'agit d'un problème quantique) et $c$ (la vitesse de propagation des ondes électromagnétiques). Avec ces trois paramètres, on peut former une seule quantité ayant les dimensions d'une pression, à savoir $\hbar c/L^4$.

**2.** Les modes stationnaires du champ électrique sont de la forme

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(xk_x+yk_y)}\sin\frac{\pi n z}{L}\right]\vec{e}_s(\hat{K})\,\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\omega_K t}$$

où $n$ est un entier $\geq 0$ et $\omega_K = c|\vec{K}|$. Lorsque $n \neq 0$, le vecteur d'onde tridimensionnel $\vec{K}$ est de la forme

$$\vec{K} = \left(k_x, k_y, \pm\frac{\pi n}{L}\right)$$

et il y a deux directions orthogonales indépendantes pour $\vec{e}_s(\hat{K})$. L'annulation de la composante tranverse du champ électrique $\vec{E}$ pour $z = 0$ et $z = L$ est alors garantie par le facteur $\sin(\pi n z/L)$. Lorsque $n = 0$, $\vec{e}_s(\hat{K})$ doit être parallèle à $Oz$ en raison de la condition d'annulation de la composante transverse de $\vec{E}$ et comme de plus $\vec{e}_s(\hat{K})$ doit être orthogonal à $\vec{k}$, il existe une seule direction de polarisation.

**3.** À chaque vecteur $\vec{k}$ correspondent deux états de polarisation (sauf si $n = 0$) et l'énergie de point zéro est

$$E_0(L) = \frac{\hbar}{2}\left(2\sum_{n,\vec{k}}{}'\,\omega_n(\vec{k})\right)$$

**4.** À la limite continue, (*cf.* exercice 8.6.10), lorsque les dimensions $L_x, L_y \to \infty$

$$\sum_{\vec{k}} \to \frac{\mathcal{S}}{(2\pi)^2}\int \mathrm{d}^2k$$

mais comme $L$ est fini, la somme sur $n$ reste discrète, et

$$E_0(L) = \frac{\hbar\mathcal{S}}{(2\pi)^2}\sum_{n,\vec{k}}{}'\int \mathrm{d}^2k\,\omega_n(\vec{k})$$

Cette intégrale diverge aux grande fréquences (*divergence dite ultraviolette*). On introduit un facteur de coupure $\chi$, qui représente physiquement le fait qu'un métal réel ne reste pas parfait aux grandes fréquences

$$E_0(L) = \frac{\hbar\mathcal{S}}{(2\pi)^2}\sum_{n=0}^{\infty}{}' \int \mathrm{d}^2k\, \omega_n(\vec{k})\chi\left(\frac{\omega_n(\vec{k})}{\omega_c}\right)$$

Posant

$$\omega^2 = \frac{c^2\pi^2n^2}{L^2} + c^2k^2 = \omega_n^2 + c^2k^2 \qquad\qquad \omega \geq \omega_n$$

et effectuant le changement de variables

$$\mathrm{d}^2k = 2\pi k\mathrm{d}k = \frac{2\pi}{c^2}\,\omega\mathrm{d}\omega$$

on obtient

$$E_0(L) = \frac{\hbar\mathcal{S}}{2\pi c^2}\sum_{n=0}^{\infty}{}' \int_{\omega_n}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \omega^2\chi\left(\frac{\omega}{\omega_c}\right) \qquad\qquad \omega_n = \frac{\pi cn}{L}$$

**5.** $E_0(L)$ dépend de $L$ uniquement par l'intermédiaire de $\omega_n = \pi nc/L$ et

$$\frac{\mathrm{d}E_0(L)}{\mathrm{d}L} = -\frac{\mathrm{d}\omega_n}{\mathrm{d}L}\,\frac{\hbar\mathcal{S}}{2\pi c^2}\,\omega_n^2\chi\left(\frac{\omega}{\omega_c}\right) = \frac{\pi nc}{L^2}\,\frac{\hbar\mathcal{S}}{2\pi c^2}\,\omega_n^2\chi\left(\frac{\omega}{\omega_c}\right)$$

On en déduit la pression interne

$$P_{\mathrm{int}} = -\frac{1}{\mathcal{S}}\,\frac{\mathrm{d}E_0(L)}{\mathrm{d}L} = -\frac{\pi^2\hbar c}{2L^4}\sum_{n=0}^{\infty}{}' n^3\chi\left(\frac{\omega}{\omega_c}\right) = -\frac{\pi^2\hbar c}{2L^4}\sum_{n=0}^{\infty}{}' g(n)$$

Le calcul de la pression extérieure s'obtient en prenant la limite $L \to \infty$, puisqu'à l'extérieur le champ n'est pas confiné entre deux plaques. On peut donc remplacer la somme discrète sur $n$ par une intégrale

$$P_{\mathrm{ext}} = -\frac{\pi^2\hbar c}{2L^4}\int_0^{\infty} g(n)$$

La pression totale vaut

$$P_{\mathrm{tot}} = P_{\mathrm{int}} - P_{\mathrm{ext}} = -\frac{\pi^2\hbar c}{2L^4}\left(\sum_{n=0}^{\infty}{}' g(n) - \int_0^{\infty} g(n)\right)$$

D'après la formule d'Euler-Mac Laurin,

$$\sum_{n=0}^{\infty}{}' g(n) - \int_0^{\infty} g(n) = \frac{1}{5!} + O\left(\frac{\pi c}{L\omega_c^2}\right)$$

ce qui donne

$$P_{\rm tot} = -\frac{\pi^2}{240}\,\frac{\hbar c}{L^4}$$

On obtient l'énergie de point zéro par intégration

$$E_0(L) = -\frac{\pi^2}{720}\,\frac{\hbar c}{L^3}$$

### 17.5.7 Observation non destructive de photons

**1.** On rappelle les résultats pour des atomes à deux niveaux $|g\rangle$ et $|e\rangle$ interagissant avec un état à plusieurs photons : les états $|\varphi_n^e\rangle = |e \otimes n\rangle$ et $|\varphi_n^g\rangle = |g \otimes (n+1)\rangle$ sont quasi dégénérés si la fréquence $\omega$ des photons est voisine de $\omega_0 = (E_e - E_g)/\hbar$, $\delta = \omega - \omega_0$. Les vecteurs propres $|\chi_n^{\pm}\rangle$ ainsi que les énergies $E_n^{\pm}$ sont donnés à une constante additive près par (17.93), voir la figure 20.3

$$\begin{aligned} E_n^- &= -\frac{1}{2}\,\hbar\sqrt{\delta^2 + (n+1)\Omega_R^2} \qquad & |\chi_n^-\rangle = -\sin\theta_n|\varphi_n^g\rangle + \cos\theta_n|\varphi_n^e\rangle \\ E_n^+ &= \frac{1}{2}\,\hbar\sqrt{\delta^2 + (n+1)\Omega_R^2} \qquad & |\chi_n^+\rangle = \cos\theta_n|\varphi_n^g\rangle + \sin\theta_n|\varphi_n^e\rangle \end{aligned}$$

où l'angle $\theta_n$ est défini par

$$\tan 2\theta_n = \frac{\Omega_R\sqrt{n+1}}{\delta} = \frac{\Omega_n}{\delta}$$

$\Omega_R$ est la fréquence de Rabi du vide et $\Omega_n = \Omega_R\sqrt{n+1}$. Lorsque le désaccord $\delta = 0$, $\tan(2\theta_n) \to \infty$ et $\theta_n = \pi/4$. Les états propres sont alors

$$\begin{aligned} |\chi_n^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-|\varphi_n^g\rangle + |\varphi_n^e\rangle) \\ |\chi_n^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_n^g\rangle + |\varphi_n^e\rangle) \end{aligned}$$

Si au contraire $\delta \to \infty$, alors $\theta_n \to 0$ et

$$|\chi_n^-\rangle = |\varphi_n^e\rangle \qquad |\chi_n^+\rangle = |\varphi_n^g\rangle$$

Ceci permet de tracer le diagramme des niveaux d'énergie $E_n^{\pm}$ de la figure 20.3 donnant $E_n^{\pm}$ en fonction de $\delta/\Omega_n$. On observe qu'il n'y a pas croisement de niveaux lorsque $\Omega_n/\delta \ll 1$ et on peut développer en fonction de ce paramètre

$$E_n^{\pm} \simeq \pm\frac{\hbar}{2}\delta \pm \hbar\frac{\Omega_n^2}{4\delta} = \pm\frac{\hbar}{2}\delta \pm \hbar(n+1)s_0$$

avec $s_0 = \Omega_R^2/(4\delta)$. Le déplacement de $|\chi_n^+\rangle$ par rapport à $|e \otimes n\rangle$ est

$$\Delta_{en} = \hbar(n+1)s_0$$

tandis que le déplacement $\Delta_{gn}$ de $|\chi^-_{n-1}\rangle$ par rapport à $|g \otimes n\rangle$ est

$$\Delta_{gn} = -\hbar n s_0$$

Lorsque l'atome traverse la cavité, le vecteur d'état de $|e\rangle$ est multiplié par $\exp(-\mathrm{i}\Delta_{en}t/\hbar)$ et celui de $|g\rangle$ par $\exp(-\mathrm{i}\Delta_{gn}t/\hbar)$. Le déphasage entre les états $|e\rangle$ et $|g\rangle$ dû au passage par la cavité est donc

$$\Phi(n) = \frac{t}{\hbar}(\Delta_{gn} - \Delta_{en}) = 2s_0 t\Big(n + \frac{1}{2}\Big)$$

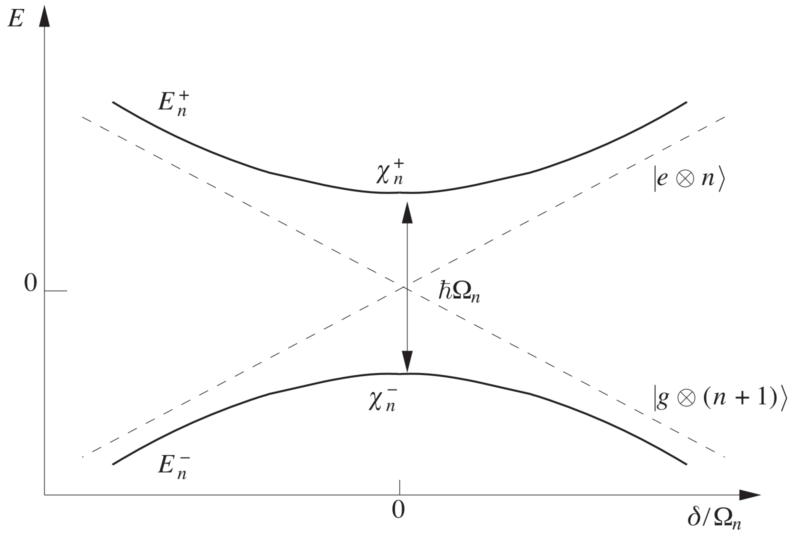



FIG. 20.3 – Schéma des niveaux de l'atome habillé dans la cavité.

**2.** On exprime $\sigma_x$ et $\sigma_y$ en fonction de $\sigma_+$ et $\sigma_-$

$$H_1(t) = -\frac{1}{2}\hbar\omega_1\Big[\sigma_+ \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}(\omega t - \phi)} + \sigma_- \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t-\phi)}\Big]$$

Dans le référentiel tournant,

$$\sigma_\pm \to \sigma_\pm \mathrm{e}^{\mp \mathrm{i}\omega t}$$

et on obtient pour $\hat{H}_1$ une expression indépendante du temps

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{2}\hbar\omega_1[\sigma_x \cos\phi + \sigma_y \sin\phi]$$

L'opérateur de rotation d'un angle $\theta$ autour de l'axe $\hat{n} = (\cos\phi, \sin\phi, 0)$ est

$$\exp\Big(-\frac{\mathrm{i}}{2}\mathrm{i}\theta(\vec{\sigma}\cdot\hat{n})\Big) = \exp\Big(-\frac{\mathrm{i}}{2}\theta(\sigma_x\cos\phi + \sigma_y\sin\phi)\Big)$$

et $\exp(-\mathrm{i}\hat{H}_1 t/\hbar)$ représente une rotation d'angle $-\omega_1 t$ autour de l'axe $\hat{n}$.

**3.** La rotation dans la cavité $R_1$ est

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}\pi}{4}\,\sigma_x\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(I + \mathrm{i}\sigma_x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 1 \end{pmatrix}$$

et l'état de l'atome à la sortie de la cavité est par conséquent

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}\pi}{4}\,\sigma_x\right)|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + \mathrm{i}|-\rangle)$$

**4.** Lorsque $n = 0$ et $\phi = 0$, l'action des cavités $R_1$ et $R_2$ se résume au produit

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}\pi}{4}\,\sigma_x\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}\pi}{4}\,\sigma_x\right) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}\pi}{2}\,\sigma_x\right) = \mathrm{i}\sigma_x$$

et $\mathrm{i}\sigma_x|+\rangle = \mathrm{i}|-\rangle$ : l'atome sort de la cavité $R_2$ dans l'état $|-\rangle$. Lorsque $n = 1$, le passage dans la cavité $C$ a pour effet

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + \mathrm{i}|-\rangle) \to \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - \mathrm{i}|-\rangle)$$

et

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}\pi}{4}\,\sigma_x\right)\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - \mathrm{i}|-\rangle) = |+\rangle$$

Si $n = 0$, l'atome sort de $R_2$ dans l'état $|-\rangle$ et si $n = 1$, il en sort dans l'état $|+\rangle$ : l'observation de l'état de l'atome permet donc de mesurer le nombre de photons dans la cavité $C$. L'observation est non destructive, car la probabilité d'absorption des photons est négligeable et le nombre de photons dans la cavité reste inchangé.

**5.** L'état

$$|\psi(n)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + \mathrm{i}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi n/q}|-\rangle)$$

s'obtient à partir de $|\psi(n = 0)\rangle$ par une rotation d'angle $\pi n/q$ autour de $Oz$. Après passage dans $R_2$, l'amplitude de probabilité pour trouver l'atome dans l'état $|\pm\rangle$ est

$$a_\pm(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\pm|\exp(-\mathrm{i}\hat{H}_1 t/\hbar)(|+\rangle + \mathrm{i}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi n/q}|-\rangle)$$

Comme

$$\exp(-\mathrm{i}\hat{H}_1 t/\hbar) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & \mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \\ \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} & 1 \end{pmatrix}$$

on trouve pour les amplitudes de probabilité $a_\pm(\phi)$

$$\begin{aligned} a_+(\phi) &= \frac{1}{2}\left(1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi n/q}\right) \\ a_-(\phi) &= \frac{\mathrm{i}}{2}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi n/q}\right) \end{aligned}$$

d'où les probabilités

$$\mathsf{p}_\pm(\phi) = \frac{1}{2}\left[1 \mp \cos\left(\frac{\pi n}{q} - \phi\right)\right]$$

**6.** La relation

$$a(j,\phi) = \langle j,\phi|\psi(n)\rangle$$

découle immédiatement des résultats de **5**, en remarquant que pour $j = 1$

$$\cos\left(\frac{\pi n}{q} - \phi + \pi\right) = -\cos\left(\frac{\pi n}{q} - \phi\right)$$

En utilisant la loi de Bayes pour les probabilités conditionnelles

$$\mathsf{p}(A|B)\mathsf{p}(B) = \mathsf{p}(B|A)\mathsf{p}(A)$$

on obtient

$$\mathsf{p}(n|j,\phi) = \frac{\mathsf{p}_0(n)\mathsf{p}(j,\phi|n)}{\mathsf{p}(j,\phi)} \qquad \mathsf{p}(j,\phi) = \sum_n \mathsf{p}(j,\phi|n)\mathsf{p}_0(n)$$

**7.** Supposons que l'état d'un système de deux particules $(i)$ et $(j)$ soit

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij}|\psi_i \otimes \varphi_j\rangle$$

et que la mesure de $j$ donne $j = j_0$. Après mesure, le vecteur d'état de $(i)$ est donné par la règle de Born généralisée (exercice 4.4.9)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_i |c_{ij_0}|^2}} \sum_i c_{ij_0}|\psi_i\rangle$$

et celui du système composé est $|\psi \otimes \varphi_{j_0}\rangle$. On écrit

$$|\psi(n)\rangle = \sum_j |j,\phi\rangle\langle j,\phi|\psi(n)\rangle$$

soit pour le vecteur d'état initial atome+photon

$$|\Psi\rangle = \sum_{j,n} \left(c_n\langle j,\phi|\psi(n)\rangle\right) \otimes |j,\phi\rangle$$

Si la mesure donne le résultat $j$, le vecteur d'état du champ est

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathsf{p}(j,\phi)}} \sum_n c_n\langle j,\phi|\psi(n)\rangle|n\rangle$$

avec

$$\mathsf{p}(j,\phi) = \sum_n \mathsf{p}(n|j,\phi)\mathsf{p}(j,\phi)$$

### 17.5.9 Forces réactives

**1.** Les valeurs propres et vecteurs propres sont donnés par (17.93). On trouve

$$|\chi_{1n}(z)\rangle \quad : \quad E_{1n} = -\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\delta^2 + n\Omega_1^2(z)}$$
$$|\chi_{2n}(z)\rangle \quad : \quad E_{2n} = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\delta^2 + n\Omega_1^2(z)}$$

La force sur l'atome dans l'état $|\chi_{1n}\rangle$, par exemple, est

$$F_{1n} = -\frac{\partial E_{1n}}{\partial z} = \frac{1}{4}\hbar n \, \frac{\partial \Omega_1^2}{\partial z} \, \frac{1}{\sqrt{\delta^2 + n\Omega_1^2(z)}}$$

et $F_{2n} = -F_{1n}$.

**2.** Les amplitudes de transition sont données par

$$\begin{aligned}
a_{11}^n &= \langle \chi_{1,n-1}|(b+b^\dagger)|\chi_{1n}\rangle = -\sin\theta_{n-1}\cos\theta_n \\
a_{21}^n &= \langle \chi_{2,n-1}|(b+b^\dagger)|\chi_{1n}\rangle = \cos\theta_{n-1}\cos\theta_n \\
a_{12}^n &= \langle \chi_{1,n-1}|(b+b^\dagger)|\chi_{2n}\rangle = -\sin\theta_{n-1}\sin\theta_n \\
a_{22}^n &= \langle \chi_{2,n-1}|(b+b^\dagger)|\chi_{2n}\rangle = -\cos\theta_{n-1}\sin\theta_n
\end{aligned}$$

En choisissant convenablement la phase $\phi$ dans (17.56), on obtient pour la valeur moyenne du champ $\mathsf{E}_H(z,t)$ dans l'état cohérent $|z\rangle$, avec $|z|^2 = \langle n\rangle$

$$\langle z|\mathsf{E}_H(z,t)|z\rangle = 2\langle n\rangle \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} \cos\omega t \, \sin kz$$

ce qui donne

$$\sqrt{\frac{\hbar\omega\langle n\rangle}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} = \frac{1}{2}\,\mathcal{E}_0$$

et pour le couplage atome-champ

$$\hbar\Omega_1(z)\sqrt{\langle n\rangle} = d\mathcal{E}_0 \sin kz = \hbar\omega_1(z)$$

où $\omega_1(z)$ est la fréquence de Rabi habituelle (*cf.* par exemple (15.36)).

**3.** On trouve immédiatement ($\theta_{\langle n\rangle} = \theta$)

$$\mathsf{p}_1^{\rm st} = \frac{\sin^4\theta}{\cos^4\theta + \sin^4\theta} \qquad \mathsf{p}_2^{\rm st} = \frac{\cos^4\theta}{\cos^4\theta + \sin^4\theta}$$

D'après la question **1**, la force sur l'atome dans l'état $|\chi_1\rangle$ est

$$F_1 = \frac{1}{4}\,\hbar\,\frac{\partial\omega_1^2(z)}{\partial z}\frac{1}{\Omega_{1\langle n\rangle}(z)}$$

et $F_2 = -F_1$. La force sur un atome est donc

$$F = F_1(\mathsf{p}_1^{\rm st} - \mathsf{p}_2^{\rm st}) = \frac{1}{4}\,\hbar\,\frac{\partial \omega_1^2(z)}{\partial z}\,\frac{1}{\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2(z)}}\,\frac{\sin^4\theta - \cos^4\theta}{\cos^4\theta + \sin^4\theta}$$

avec

$$\frac{\sin^4\theta - \cos^4\theta}{\cos^4\theta + \sin^4\theta} = -\frac{2\delta\Omega_{1\langle n\rangle}}{\delta^2 + \Omega^2_{1\langle n\rangle}(z)}$$

En rassemblant tous les facteurs

$$F = -\frac{1}{2}\,\hbar\frac{\partial \omega_1^2(z)}{\partial z}\,\frac{\delta}{2\delta^2 + \omega_1^2(z)}$$

ou sous forme vectorielle

$$\vec{F} = -\frac{1}{2}\,\hbar\vec{\nabla}\omega_1^2(\vec{r})\frac{\delta}{2\delta^2 + \omega_1^2(z)}$$

en accord avec (15.60) si $\Gamma \ll \omega_1$, c'est-à-dire si le laser est suffisamment intense.

### 17.5.10 Capture radiative de neutrons par l'hydrogène

**1.** Lorsque $r \to 0$,

$$\psi(r) \simeq \frac{pr + \delta}{pr} = 1 + \frac{\delta}{pr} = 1 - \frac{a}{r} = -\frac{a}{r}\left(1 - \frac{r}{a}\right)$$

**2.** Les transitions dipolaires électriques sont supprimées à très basse énergie en raison de la barrière centrifuge : une onde $P$ possède une probabilité de présence qui s'annule rapidement quand on s'approche de l'origine. Partant de l'expression (17.50) du champ magnétique quantifié, nous devons conserver les transitions entre états à zéro photon et à un photon, qui sont donnés par le terme $a^\dagger_{\vec{k}\lambda}$

$$\langle 1 \text{ photon}|a^\dagger_{\vec{k}\lambda}|0 \text{ photon}\rangle = 1$$

Il nous reste seulement $W'$, conformément à l'énoncé.

**3.** Le terme

$$\frac{2\pi}{\hbar}\,|\langle f|W|i\rangle|^2\delta(\hbar\omega - (E_i - E_f))$$

vient de la règle d'or de Fermi (8.152), $\mathcal{F}$ est le facteur de flux et

$$\frac{\mathcal{V}\omega^2 \mathrm{d}\omega}{(2\pi)^3 c^3}$$

est l'espace de phase des états finaux du photon.

**4.** Le moment angulaire est $\vec{J} = (\hbar/2)(\vec{\sigma}_p + \vec{\sigma}_n)$ et $\vec{J}|\chi_s\rangle = 0$ car $|\chi_s\rangle$ est un état de moment angulaire nul. De même,

$$\langle\chi_s|\vec{\sigma}_p|\chi_s\rangle = 0$$

parce que $\vec{\sigma}_p$ est un opérateur vectoriel dont les éléments de matrice sont nuls en raison du théorème de Wigner-Eckart, si les éléments de matrice sont calculés entre états de moment angulaire zéro. Si $\psi_i(\vec{r})$ est la fonction d'onde spatiale d'un état ${}^3S_1$, le potentiel est le même que celui du deutéron, et comme deux fonctions d'onde correspondant à deux valeurs propres différentes de l'énergie sont orthogonales, nous avons

$$\int \mathrm{d}^3r\, \psi_f^*(\vec{r})\psi_i(\vec{r}) = \int \mathrm{d}^3r\, \psi_D^*(\vec{r})\psi_i(\vec{r}) = 0$$

Si, au contraire, la fonction d'onde initiale correspond à un état ${}^1S_0$, l'intégrale ne s'annule pas

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}^3r\, \psi_D^*(\vec{r})\psi_i(\vec{r}) &= -\frac{N_D}{\sqrt{4\pi}}\int \mathrm{d}\Omega \int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\, \frac{\mathrm{e}^{-\kappa r}}{r}\,\frac{a_s}{r}\left(1-\frac{a_s}{r}\right)\\ &= -N_D a_s\sqrt{4\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}r\,\mathrm{e}^{-\kappa r}\left(1-\frac{a_s}{r}\right) = \frac{N_D\sqrt{4\pi}}{\kappa^2}(1-\kappa a_s)\end{aligned}$$

**5.** Nous utilisons la relation de fermeture (17.30)

$$\sum_\lambda e_\lambda^i(\vec{k})e_\lambda^j(\vec{k}) = \delta_{ij} - \hat{k}_i\hat{k}_j$$

et nous en déduisons

$$\begin{aligned}\sum_m |\langle\chi_t^m|\vec{\sigma}_p|\chi_s\rangle|^2 &= \sum_m \langle\chi_s\vec{\sigma}_p|\chi_t^m\rangle\langle\chi_t^m|\vec{\sigma}_p|\chi_s\rangle\\ &= \sum_m \langle\chi_s|\vec{\sigma}_p|\chi_t^m\rangle\cdot\langle\chi_t^m|\vec{\sigma}_p|\chi_s\rangle + \langle\chi_s|\vec{\sigma}_p|\chi_s\rangle\cdot\langle\chi_s|\vec{\sigma}_p|\chi_s\rangle\end{aligned}$$

où nous nous sommes servis de $\langle\chi_s|\vec{\sigma}_p|\chi_s\rangle = 0$. Nous utilisons ensuite la relation de fermeture dans l'espace de Hilbert à quatre dimensions des deux spins

$$\sum_m |\chi_t^m\rangle\langle\chi_t^m| + |\chi_s\rangle\langle\chi_s| = I$$

de sorte que

$$|\langle|W'_{\mathrm{spin}}|^2\rangle = \frac{1}{4}\langle\chi_s|\vec{\sigma}_p^2 - (\vec{\sigma}_p\cdot\hat{k})^2|\chi_s\rangle = \frac{1}{2}$$

parce que $\vec{\sigma}_p^2 = 3$ and $(\vec{\sigma}_p\cdot\hat{k})^2 = 1$.

**6.** Rassemblons les différents facteurs que nous avons examinés dans les questions précédentes et qui conduisent au résultat de l'énoncé.

1. Un facteur
$$\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}$$
a pour origine l'expression du champ magnétique quantifié.
2. Un facteur
$$\frac{1}{4}\,\frac{q_p^2\hbar^2}{4M^2}\,(g_p-g_n)^2$$
a pour origine le couplage des moments magnétiques avec le champ magnétique quantifié.
3. Un facteur 1/2 vient de la sommation sur les spins.
4. Un facteur
$$\frac{4\pi N_D^2}{\kappa^4}(1-\kappa a_s)^2=\frac{8\pi}{\kappa^3}(1-\kappa a_s)^2$$
a pour origine l'intégrale de recouvrement des fonctions d'onde.
5. Comme $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ est isotrope, un facteur $4\pi$ vient de l'intégration sur $\mathrm{d}\Omega$.
6. $\hbar\omega=B$ vient de la conservation de l'énergie.

On trouve finalement l'estimation numérique suivante du résultat théorique
$$\sigma=7.72\times10^{-4}\,(\mathrm{MeV})^2=30.9\,(\mathrm{fm})^2$$

### 17.5.11 L'expérience de Badurek *et al.*

Partons du vecteur d'état initial
$$|\Psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\,(|\uparrow\rangle_1+|\uparrow\rangle_2)\otimes|z(t=0)\rangle$$

La valeur moyenne du champ $\vec{\mathsf{B}}_1$ au temps $t$ est
$$\langle\vec{\mathsf{B}}_1\rangle(t)=\langle z(t)|\vec{\mathsf{B}}_1|z(t)\rangle=2\alpha|z|\cos(\omega t-\phi)\hat{x}$$

ce qui montre, par comparaison avec l'expression classique
$$\vec{B}_1=B_1\hat{x}\cos(\omega t-\phi)$$

que $2\alpha|z|=B_1$. Dans le point de vue de l'interaction, avec pour hamiltonien $H_0$
$$H_0=\hbar\omega a^\dagger a-\frac{1}{2}\,\hbar\omega_0\sigma_z$$
nous avons
$$\tilde{H}_{\rm int}=-\frac{1}{2}\alpha\hbar\gamma\left[\sigma_+\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega_0 t}+\sigma_-\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\right]\left[a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+a\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\omega t}\right]$$

et à l'approximation séculaire

$$\tilde{H}_{\rm int} = -\frac{1}{2}\alpha\gamma\hbar\left[\sigma_+ \, a \, {\rm e}^{-{\rm i}\delta t} + \sigma_- \, a^\dagger \, {\rm e}^{{\rm i}\delta t}\right]$$

où $\delta = \omega - \omega_0$ est le désaccord et $\gamma$ le facteur gyromagnétique. L'action de l'opérateur $a$ sur un état cohérent $|z\rangle$ est simple : $a|z\rangle = z|z\rangle$, mais non celle de $a^\dagger$. On définit le vecteur $|\varepsilon\rangle$ comme la différence entre $a^\dagger|z\rangle$ et $z^*|z\rangle$

$$a^\dagger|z\rangle = z^*|z\rangle + |\varepsilon\rangle$$

Il est facile de montrer que $\langle z|\varepsilon\rangle = 0$ et que $\|\varepsilon\|^2 = \langle\varepsilon|\varepsilon\rangle = 1$. En effet, en multipliant l'équation

$$a^\dagger|z\rangle = z^*|z\rangle + |\varepsilon\rangle$$

par le bra $\langle z|$, on trouve

$$\langle z|a^\dagger|z\rangle = z^* = z^* + \langle z|\varepsilon\rangle$$

et donc $\langle z|\varepsilon\rangle = 0$. D'autre part,

$$\|\varepsilon\|^2 = (\langle z|a - z\langle z|)(a^\dagger|z\rangle - z^*|z\rangle) = 1$$

Ajouter un photon à un état cohérent le modifie de façon négligeable si $|z| \gg 1$. L'action de $\tilde{H}_{\rm int}$ sur un état cohérent peut donc s'écrire grâce à la substitution

$$a^\dagger|z\rangle \to z^*|z\rangle + |\varepsilon\rangle$$

de la façon suivante

$$\tilde{H}_{\rm int} \simeq -\frac{1}{2}\hbar\omega_1\left[\sigma_+ \, {\rm e}^{{\rm i}\phi} \, {\rm e}^{-{\rm i}\delta t} + \sigma_- \, {\rm e}^{-{\rm i}\phi} \, {\rm e}^{{\rm i}\delta t}\right]|z\rangle\langle z| - \frac{1}{2}\frac{\hbar\omega_1}{|z|}\,\sigma_- \, {\rm e}^{{\rm i}\delta t}|\varepsilon\rangle\langle z|$$

Le premier terme de $\tilde{H}_{\rm int}$ reproduit exactement le hamiltonien d'interaction avec un champ classique, le deuxième terme, responsable de l'intrication spin-champ, est négligeable lorsque $|z| \gg 1$, ce qui est le cas pour un champ classique. L'interaction avec le champ classique maintient la cohérence entre les états de spin $|\uparrow\rangle_1$ et $|\uparrow\rangle_2$, et les interférences ne sont pas détruites.

# 20.18 Exercices du chapitre 18

## 18.4.6 Superposition d'états cohérents

**1.** Le terme $[H_0, \rho]$ ne contribue pas à l'évolution de $\rho_{nn}$ parce que $H_0$ est diagonal dans la base $\{|n\rangle\}$. De plus,

$$\begin{aligned}\langle n|a^\dagger a\rho + \rho a^\dagger a|n\rangle &= 2n\rho_{nn}\\ \langle n|a\rho a^\dagger|n\rangle &= (n+1)\rho_{n+1,n+1}\end{aligned}$$

et l'évolution de $\rho_{nn}$ est donc

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{nn}}{\mathrm{d}t} = -n\Gamma\rho_{nn} + (n+1)\Gamma\rho_{n+1,n+1}$$

Si nous choisissons $n = 0$, nous trouvons $\mathrm{d}\rho/\mathrm{d}t = \Gamma\rho_{11}$, ce qui veut dire que la population de l'état fondamental augmente à un taux qui est proportionnel à celle de l'état excité multipliée par $\Gamma$. Le processus physique correspondant est l'émission spontanée d'un photon, de sorte que $\Gamma$ est le taux d'émission spontanée. L'équation d'évolution de $\rho_{n+1,n}$ est obtenue de

$$\begin{aligned}
\langle n+1|[H_0,\rho]|n\rangle &= \hbar\omega_0\rho_{n+1,n} \\
\langle n+1|a\rho a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{(n+1)(n+2)}\,\rho_{n+2,n+1} \\
\langle n+1|\{a^\dagger a,\rho\}|n\rangle &= (2n+1)\rho_{n+1,n}
\end{aligned}$$

de sorte que

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{n+1,n}}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}\omega_0\rho_{n+1,n} + \Gamma\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\rho_{n+2,n+1} - \frac{1}{2}\Gamma(2n+1)\rho_{n+1,n}$$

**2.** Utilisant (2.70), nous obtenons

$$\mathrm{e}^{\lambda^* a}\,a^\dagger\,\mathrm{e}^{-\lambda^* a} = a^\dagger + \lambda^*[a,a^\dagger] = a^\dagger + \lambda^*$$

c'est-à-dire

$$a^\dagger\,\mathrm{e}^{-\lambda^* a} = \mathrm{e}^{-\lambda^* a}\left(a^\dagger + \lambda^*\right)$$

Prenant la dérivée de $C(\lambda,\lambda^*;t)$ par rapport à $\lambda$, nous en déduisons

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\lambda}\mathrm{Tr}\left(\rho\,\mathrm{e}^{\lambda a^\dagger}\,\mathrm{e}^{-\lambda^* a}\right) &= \mathrm{Tr}\left(\rho\,a^\dagger\,\mathrm{e}^{\lambda a^\dagger}\,\mathrm{e}^{-\lambda^* a}\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left(\rho\,\mathrm{e}^{\lambda a^\dagger}\,\mathrm{e}^{-\lambda^* a}(a^\dagger+\lambda^*)\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left((a^\dagger+\lambda^*)\rho\,\mathrm{e}^{\lambda a^\dagger}\,\mathrm{e}^{-\lambda^* a}\right)
\end{aligned}$$

où nous nous sommes servis de l'invariance de la trace par permutation circulaire pour obtenir la dernière ligne. Cette équation s'écrit schématiquement comme

$$\left(\frac{\partial}{\partial\lambda} - \lambda^*\right) \to a^\dagger\,\rho \quad \text{tandis que} \quad \frac{\partial}{\partial\lambda} \to \rho\,a^\dagger$$

Nous obtenons, de même, pour $\partial/\partial\lambda^*$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\lambda^*}\mathrm{Tr}\left(\rho\,\mathrm{e}^{\lambda a^\dagger}\,\mathrm{e}^{-\lambda^* a}\right) &= -\mathrm{Tr}\left(\rho\,\mathrm{e}^{\lambda a^\dagger}\,a\,\mathrm{e}^{-\lambda^* a}\right) \\
&= -\mathrm{Tr}\left(\rho\,(a-\lambda)\mathrm{e}^{\lambda a^\dagger}\,a\,\mathrm{e}^{-\lambda^* a}\right)
\end{aligned}$$

ce qui peut se récrire

$$\left(\lambda - \frac{\partial}{\partial\lambda^*}\right) \to \rho a \quad \text{tandis que} \quad -\frac{\partial}{\partial\lambda^*} \to a\,\rho$$

**3.** Examinons les différents termes dans le membre de droite de (18.36). D'après les résultats de la question précédente,

$$\begin{aligned} a^\dagger a\rho \quad &\to \quad \left(\frac{\partial}{\partial\lambda} - \lambda^*\right)\left(-\frac{\partial}{\partial\lambda^*}\right) = -\frac{\partial^2}{\partial\lambda\partial\lambda^*} + \lambda^*\frac{\partial}{\partial\lambda^*} \\ \rho a^\dagger a \quad &\to \quad \left(\lambda - \frac{\partial}{\partial\lambda^*}\right)\left(\frac{\partial}{\partial\lambda}\right) = -\frac{\partial^2}{\partial\lambda\partial\lambda^*} + \lambda\frac{\partial}{\partial\lambda} \end{aligned}$$

de sorte que

$$[a^\dagger a, \rho] \to \lambda^*\frac{\partial}{\partial\lambda^*} - \lambda\frac{\partial}{\partial\lambda}$$

De même,

$$a\rho a^\dagger \to \frac{\partial^2}{\partial\lambda\partial\lambda^*}$$

et

$$\begin{aligned} \{a^\dagger a, \rho\} \quad &= \quad -\left(\frac{\partial}{\partial\lambda} - \lambda^*\right)\left(-\frac{\partial}{\partial\lambda^*}\right) + \left(\lambda - \frac{\partial}{\partial\lambda^*}\right)\left(\frac{\partial}{\partial\lambda}\right) \\ &= \quad -\frac{\partial^2}{\partial\lambda\partial\lambda^*} + \lambda^*\frac{\partial}{\partial\lambda^*} + \lambda\frac{\partial}{\partial\lambda} \end{aligned}$$

Combinant tous ces résultats, nous en déduisons l'équation aux dérivées partielles

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \left(\frac{\Gamma}{2} - \mathrm{i}\omega_0\right)\lambda\frac{\partial}{\partial\lambda} + \left(\frac{\Gamma}{2} + \mathrm{i}\omega_0\right)\lambda^*\frac{\partial}{\partial\lambda^*}\right] C(\lambda, \lambda^*; t) = 0$$

ou encore

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \left(\frac{\Gamma}{2} - \mathrm{i}\omega_0\right)\frac{\partial}{\partial\ln\lambda} + \left(\frac{\Gamma}{2} + \mathrm{i}\omega_0\right)\frac{\partial}{\partial\ln\lambda^*}\right] C(\lambda, \lambda^*; t) = 0$$

Afin d'appliquer la méthode des caractéristiques, nous écrivons

$$\frac{\mathrm{d}t}{1} = \frac{\mathrm{d}\ln\lambda}{\Gamma/2 - \mathrm{i}\omega_0} = \frac{\mathrm{d}\ln\lambda^*}{\Gamma/2 + \mathrm{i}\omega_0}$$

d'où

$$\lambda = \lambda_0 \exp[(\Gamma/2 - \mathrm{i}\omega_0)t] \qquad \lambda^* = \lambda_0^* \exp[(\Gamma/2 + \mathrm{i}\omega_0)t]$$

ou en résolvant pour $\lambda_0$, $\lambda_0^*$

$$\lambda_0 = \lambda \exp[-(\Gamma/2 - \mathrm{i}\omega_0)t] \qquad \lambda_0^* = \lambda^* \exp[-(\Gamma/2 + \mathrm{i}\omega_0)t]$$

$\lambda\exp[-(\Gamma/2 - \mathrm{i}\omega_0)t]$ et $\lambda^*\exp[-(\Gamma/2 + \mathrm{i}\omega_0)t]$ sont constants le long des caractéristiques. L'équation aux dérivées partielles pour $C(\lambda, \lambda^*; t)$ nous dit que cette fonction est constante le long des caractéristiques

$$C(\lambda, \lambda^*; t) = C_0(\lambda, \lambda^*; t = 0) = C_0(\lambda, \lambda^*)$$

**4.** L'opérateur statistique est au temps $t = 0$

$$C_0(\lambda, \lambda^*) = \mathrm{Tr}\left(|z\rangle\langle z|\,\mathrm{e}^{\lambda a^\dagger}\,\mathrm{e}^{-\lambda^* a}\right) = \langle z|\mathrm{e}^{\lambda a^\dagger}\,\mathrm{e}^{-\lambda^* a}|z\rangle = \exp(\lambda z^* - \lambda^* z)$$

Nous avons donc au temps $t$

$$C(\lambda, \lambda^*; t) = \exp\left[z^*\lambda\mathrm{e}^{-(\Gamma/2-\mathrm{i}\omega_0)t}, \lambda^* z\mathrm{e}^{-(\Gamma/2+\mathrm{i}\omega_0)t}\right]$$

ce qui peut se récrire

$$C(\lambda, \lambda^*; t) = \exp\left[\lambda z^*(t) - \lambda^* z(t)\right]$$

avec

$$z(t) = z\mathrm{e}^{-(\Gamma/2+\mathrm{i}\omega_0)t}$$

et par conséquent, $C(\lambda, \lambda^*; t)$ correspond à l'état cohérent

$$|z(t)\rangle = |z\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\,\mathrm{e}^{-\Gamma t/2}\rangle$$

**5.** Lorsque $|\Phi\rangle$ est une superposition d'états cohérents

$$|\Phi\rangle = c_1|z_1\rangle + c_2|z_2\rangle$$

alors

$$\begin{aligned} C(\lambda, \lambda^*; t = 0) &= |c_1|^2\mathrm{e}^{(\lambda z_1^* - \lambda^* z_1)} + |c_2|^2\mathrm{e}^{(\lambda z_2^* - \lambda^* z_2)} \\ &+ c_1 c_2^*\langle z_2|z_1\rangle\mathrm{e}^{(\lambda z_2^* - \lambda^* z_1)} + c_1^* c_2\langle z_1|z_2\rangle\mathrm{e}^{(\lambda z_1^* - \lambda^* z_2)} \end{aligned}$$

Les deux derniers termes ont pour origine le fait que $|\Phi\rangle$ est une superposition cohérente, alors que ces termes seraient absents dans un superposition incohérente des deux états cohérents. Au temps $t$, nous avons

$$\begin{aligned} C(\lambda, \lambda^*; t) &= |c_1|^2\mathrm{e}^{[\lambda z_1^*(t) - \lambda^* z_1(t)]} + |c_2|^2\mathrm{e}^{[\lambda z_2^*(t) - \lambda^* z_2(t)]} \\ &+ c_1 c_2^*\langle z_2|z_1\rangle\mathrm{e}^{[\lambda z_2^*(t) - \lambda^* z_1(t)]} + c_1^* c_2\langle z_1|z_2\rangle\mathrm{e}^{[\lambda z_1^*(t) - \lambda^* z_2(t)]} \end{aligned}$$

On remarque que les produits scalaires dans ces deux derniers termes sont $\langle z_2|z_1\rangle$ et $\langle z_1|z_2\rangle$, et non $\langle z_2(t)|z_1(t)\rangle$ et $\langle z_1(t)|z_2(t)\rangle$. Si l'on veut retrouver la même forme qu'à $t = 0$, on doit écrire par exemple

$$\langle z_2|z_1\rangle = \frac{\langle z_2|z_1\rangle}{\langle z_2(t)|z_1(t)\rangle}\,\langle z_2(t)|z_1(t)\rangle = \eta(t)\langle z_2(t)|z_1(t)\rangle$$

Nous pouvons alors écrire l'état final comme une superposition de deux états cohérents, mais la cohérence a été réduite par un facteur

$$|\eta(t)| = \exp\left[-\frac{1}{2}|z_1 - z_2|^2\left(1 - \mathrm{e}^{-\Gamma t}\right)\right] \simeq \exp\left[-\frac{\Gamma}{2}|z_1 - z_2|^2\right]$$

La cohérence est donc amortie selon un taux qui est plus grand par un facteur $|z_1 - z_2|^2$ que le taux d'amortissement $\Gamma$ des états cohérents individuels. Le temps de décohérence est donc

$$\tau_{\mathrm{dec}} = \frac{2}{\Gamma|z_1 - z_2|^2}$$

**5.** Au temps $t = 0$, l'oscillateur est dans un état de superposition

$$|\Phi(t = 0)\rangle = c_1|0\rangle + c_2|z\rangle$$

Le vecteur d'état global est à $t = 0$

$$|\Psi(t = 0)\rangle = c_1|0 \otimes 0_E\rangle + c_2|z \otimes 0_E\rangle$$

où $|0_E\rangle$ est le vecteur d'état (état du vide) du champ de rayonnement, étant donné que à $T = 0$ aucun photon (ou phonon) n'est disponible. La première composante de $|\Psi\rangle$ reste inchangée sous l'évolution temporelle, parce que l'émission spontanée n'est pas possible à partir de $|0\rangle$. Au contraire, un photon sera émis en moyenne au bout d'un temps $\sim \Gamma|z|^2$ en raison de la seconde composante de $|\Psi\rangle$. De fait, l'évolution de $\rho_{nn}$ dans la question **1** nous dit que l'amplitude de désintégration d'un état excité $|n\rangle$ est $n\Gamma$, et le nombre moyen $\langle n\rangle$ est égal à $|z|^2$, $|z|^2 = \langle n\rangle$ dans l'état cohérent $|z\rangle$. Dès qu'un photon est émis, les deux composantes de $|\Phi\rangle$ s'intriquent à des états orthogonaux de l'environnement, et l'opérateur statistique réduit perd toute cohérence de phase. Le temps de décohérence est donc le temps moyen d'émission *d'un seul photon*, et $\tau_{\mathrm{dec}} \simeq 1/(|z|^2\Gamma)$.

## 18.4.8 Approximation séculaire et équation de Lindblad

**1.** Nous nous limitons à un seul indice $\alpha$, le cas général s'en déduisant trivialement. Nous avons donc

$$W = \hbar A R$$

où $\hbar$ a été introduit de façon à compenser le facteur $1/\hbar^2$ de (18.62). Il est clair, d'après sa définition, que $A(\omega)$ diminue l'énergie de $\hbar\omega$. Ceci est confirmé par un calcul direct du commutateur $[H_A, A(\omega)]$

$$[H_A, A(\omega)] = \sum_{\varepsilon_1}\left[\sum_{\varepsilon'-\varepsilon=\hbar\omega} \varepsilon_1 \mathcal{P}(\varepsilon_1)\,\mathcal{P}(\varepsilon)\,A\,\mathcal{P}(\varepsilon') - \mathcal{P}(\varepsilon)\,A\,\mathcal{P}(\varepsilon')\,\mathcal{P}(\varepsilon_1)\varepsilon_1\right]$$

Utilisant $\mathcal{P}(\varepsilon_1)\,\mathcal{P}(\varepsilon) = \delta_{\varepsilon,\varepsilon_1}\,\mathcal{P}(\varepsilon)$, nous en déduisons

$$[H_A, A(\omega)] = \sum_{\varepsilon'-\varepsilon=\hbar\omega} (\varepsilon - \varepsilon')\mathcal{P}(\varepsilon)\,A\,\mathcal{P}(\varepsilon') = \hbar\omega A(\omega)$$

Trois autres identités nous seront utiles :

(i)

$$A(-\omega) = A^\dagger(\omega)$$

(ii)

$$\sum_\omega A(\omega) = \sum_{\varepsilon,\varepsilon'} \mathcal{P}(\varepsilon)\,A\,\mathcal{P}(\varepsilon') = A$$

(iii)

$$[H_A, A^\dagger(\omega)A(\omega)] = A^\dagger(\omega)[H_A, A(\omega)] + [H_A, A^\dagger(\omega)]A(\omega) = 0$$

**2.** Il est commode de partir de l'équation pilote pour $\tilde{\rho}$. Examinons un de ses termes

$$\begin{aligned}\int_0^t \mathrm{d}t'\, g(t')A(t-t')\tilde{\rho}(t)A(t) &= \sum_{\omega,\omega'} \int_0^t \mathrm{d}t'\, g(t')A(\omega)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\,\tilde{\rho}(t)\,A(\omega')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega' t} \\ &= \sum_{\omega,\omega'} G_+(\omega)A(\omega)\tilde{\rho}(t)A(\omega')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega+\omega')t}\end{aligned}$$

À l'approximation séculaire, on conserve seulement les termes tels que $\omega+\omega' = 0$. Il est alors facile d'écrire $\mathrm{d}\tilde{\rho}/\mathrm{d}t$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}}{\mathrm{d}t} \;=\; & \sum_\omega \Big\{(G_+(\omega) + G_+^*(\omega))A(\omega)\,\tilde{\rho}\,A(-\omega) \\ & -G_+(\omega)A(-\omega)\,A(\omega)\,\tilde{\rho} - G_+^*(\omega)\tilde{\rho}\,A(-\omega)\,A(\omega)\Big\}\end{aligned}$$

Décomposons $G(\omega)$ en parties réelle et imaginaire

$$G_\pm(\omega) = \frac{1}{2}\,\Gamma_\pm(\omega) - \mathrm{i}\Delta_\pm(\omega)$$

et définissons le hamiltonien du déplacement Lamb (Lamb shift) $H_{\mathrm{LS}}$ par

$$H_{\mathrm{LS}} = \sum_\omega \Delta_\pm(\omega)A(-\omega)\,A(\omega)$$

Comme $A(-\omega)A(\omega)$ commute avec $H_A$, on peut écrire

$$H_{\mathrm{LS}} = \sum_\varepsilon \Delta_\varepsilon \mathcal{P}(\varepsilon)$$

avec un choix des projecteurs $\mathcal{P}(\varepsilon)$ qui n'est pas unique en général. On met alors $\mathrm{d}\rho/\mathrm{d}t$ sous la forme de Lindblad

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H_A + H_{\mathrm{LS}}, \rho] + \sum_{\omega} \Gamma_+(\omega)\Big[A(\omega)\,\rho\,A(-\omega) - \frac{1}{2}\{A(-\omega)\,A(\omega), \rho\}\Big]$$

**3.** Définissons

$$P(\varepsilon_n, t) = \langle\varepsilon_n|\rho(t)|\varepsilon_n\rangle$$

où les niveaux $\varepsilon_n$ de $H_A + H_{\mathrm{LS}}$ sont supposés non dégénérés. Nous devons alors calculer l'élément de matrice $nn$ du membre de droite de l'équation de Lindblad. Examinons le premier terme

$$\begin{aligned}
&\langle\varepsilon_n|A(\omega)\rho(t)A(-\omega)|\varepsilon_n\rangle \\
&\quad = \langle\varepsilon_n|A(\omega)|\varepsilon_n + \hbar\omega\rangle\langle\varepsilon_n + \hbar\omega|\rho(t)|\varepsilon_n + \hbar\omega\rangle\langle\varepsilon_n + \hbar\omega|A(-\omega)|\varepsilon_n\rangle \\
&\quad = |\langle\varepsilon_n|A(\omega)|\varepsilon_n + \hbar\omega\rangle|^2 P(\varepsilon_n + \hbar\omega, t) \\
&\quad = W(\varepsilon_n|\varepsilon_n + \hbar\omega)P(\varepsilon_n + \hbar\omega, t)
\end{aligned}$$

Nous en déduisons l'équation pilote

$$\frac{\mathrm{d}P(\varepsilon_n, t)}{\mathrm{d}t} = \sum_{\omega}\Big\{W(\varepsilon_n|\varepsilon_n + \hbar\omega)P(\varepsilon_n + \hbar\omega, t) - W(\varepsilon_n + \hbar\omega|\varepsilon_n)P(\varepsilon_n, t)\Big\}$$

### 18.4.11 L'équation de Fokker-Planck-Kramers pour une particule brownienne

**1.** Nous nous limitons au deuxième terme $[X, \{P, \rho\}]$ du membre de gauche de(18.96), car les deux autres termes sont traités par une technique identique. En utilisant la forme (12.116) de $w$, nous obtenons immédiatement

$$\begin{aligned}
w(x, p; t) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}py/\hbar}\,\langle x + \frac{y}{2}\{P, \rho\}|x - \frac{y}{2}\rangle\, y\,\mathrm{d}y \\
&= \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\frac{\partial}{\partial p}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}py/\hbar}\,\langle x + \frac{y}{2}|\{P, \rho\}|x - \frac{y}{2}\rangle\,\mathrm{d}y
\end{aligned}$$

Nous utilisons ensuite la forme (12.117) de $w$

$$\begin{aligned}
w(x, p; t) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\frac{\partial}{\partial p}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}py/\hbar}\,\langle x + \frac{y}{2}|\{P, \rho\}|p - \frac{y}{2}\rangle\mathrm{d}y \\
&= \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\frac{\partial}{\partial p}\,p\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}xy/\hbar}\,\langle p + \frac{y}{2}|\{P, \rho\}|x - \frac{y}{2}\rangle\mathrm{d}y \\
&= \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\,[p w(x, p; t)]
\end{aligned}$$

**2.** Il suffit d'observer que $w(x, p; t)$ doit s'annuler quand $x \to \pm\infty$.

## 20.19 Exercices du chapitre 19

### 19.6.1 Décomposition polaire d'une transformation de Lorentz

**2.** De la relation

$$(\Lambda^0{}_0)^2 - \sum_{i=1}^{3}(\Lambda^i{}_0)^2 = 1$$

on déduit $\sum_{i=1}^{3}(\Lambda^i{}_0)^2 = \sinh^2\eta$. On peut donc définir un vecteur unitaire $\hat{n}$ de composantes $\Lambda^i{}_0 = -\hat{n}^i \sinh\eta$ et utiliser la transformation de Lorentz spéciale $S$ sous la forme (19.7). La transformation $S^{-1}\Lambda$ ne change pas $e_0$ : $S^{-1}\Lambda e_0 = e_0$, et elle agit donc uniquement sur les coordonnées d'espace : c'est une rotation.

**3.** Comme $RR'^{-1}$ est une rotation, $RR'^{-1}e_0 = e_0$, et par conséquent $S'e_0 = Se_0 = e'_0$ : les transformations de Lorentz spéciales $S$ et $S'$ coïncident, ce qui implique $R = R'$.

### 19.6.2 Relations de commutation des $J_{\mu\nu}$ et des $W_\lambda$

**1.** Pour calculer le commutateur $[J_{\mu\nu}, W_\lambda]$, on se sert de l'identité

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$

d'où les termes $X_1$ et $X_2$.

**2.** (i) Examinons d'abord le cas où les 3 indices $\mu$, $\nu$ et $\lambda$ sont différents, et étudions le premier terme de $X_1$

$$X'_1 = 2\varepsilon_{\lambda\nu\tau\rho} J_\mu{}^\tau P^\rho$$

Comme $\tau \neq \mu$, on a nécessairement $\rho = \mu$ et

$$X'_1 = 2\varepsilon_{\lambda\nu\tau\mu} J_\mu{}^\tau P^\mu = -2\varepsilon_{\lambda\mu\tau\nu} J^{\mu\tau} P_\mu$$

Passons au premier terme de $X_2$

$$X'_2 = \varepsilon_{\lambda\sigma\tau\nu} J^{\sigma\tau} P_\mu$$

Dans ce cas, soit $\sigma = \mu$, soit $\tau = \mu$

$$X'_2 = \varepsilon_{\lambda\mu\tau\nu} J^{\mu\tau} P_\mu + \varepsilon_{\lambda\sigma\mu\nu} J^{\sigma\mu} P_\mu = 2\varepsilon_{\lambda\mu\tau\nu} J^{\mu\tau} P_\mu$$

ce qui implique $X'_1 + X'_2 = 0$. On montre de même que $X''_1 + X''_2 = 0$, et donc $X_1 + X_2 = 0$.
(ii) Cas où $\lambda = \mu \neq \nu$

$$\begin{aligned} X'_1 &= 2\varepsilon_{\lambda\nu\tau\rho} J_\mu{}^\tau P^\rho = -2g_{\mu\lambda}\varepsilon_{\nu\lambda\tau\rho} J^{\lambda\tau} P^\rho \\ &= -2g_{\mu\lambda} W_\nu \end{aligned}$$

Le cas où $\lambda = \nu$ donne $X'_1 = 0$. Passons à $X'_2$ dans le cas où $\mu = \lambda \neq \nu$

$$\begin{aligned} X'_2 &= \varepsilon_{\lambda\sigma\tau\nu} g_{\mu\lambda} J^{\sigma\tau} P^\lambda = -g_{\mu\lambda}\varepsilon_{\nu\sigma\tau\lambda} J^{\sigma\tau} P^\lambda \\ &= -g_{\mu\lambda} W_\nu \end{aligned}$$

### 19.6.3 Rotation de Thomas-Wigner et précession de Thomas

**1.** Partons de (19.7) écrite dans le point de vue passif

$$\begin{aligned} x'^0 &= x^0 \cosh\eta - \vec{x}\cdot\hat{n}\sinh\eta \\ x'^i &= x^i - (\vec{x}\cdot\hat{n})\hat{n}^i + [(\vec{x}\cdot\hat{n})\cosh\eta - x^0\sinh\eta]\hat{n}^i \end{aligned}$$

La composante suivant $\hat{x}_3$ ne joue aucun rôle dans ce qui suit et sera omise. Le produit scalaire tridimensionnel $\vec{x}\cdot\hat{n}$ vaut

$$\vec{x}\cdot\hat{n} = x^1\cos\theta + x^2\sin\theta$$

Les coordonnées transformées sont

$$\begin{aligned} x'^0 &= x^0\cosh\eta - x^1\sinh\eta\cos\theta - x^2\sinh\eta\sin\theta \\ x'^1 &= -x^0\sinh\eta\cos\theta + x^1[1 + (\cosh\eta - 1)\cos^2\theta] + x^2(\cosh\eta - 1)\sin\theta\cos\theta \\ x'^2 &= -x^0\sinh\eta\sin\theta + x^1(\cosh\eta - 1)\sin\theta\cos\theta + x^2[1 + (\cosh\eta - 1)\sin^2\theta] \end{aligned}$$

d'où l'on déduit la matrice représentative du boost. Comme on se limite aux composantes $(0, 1, 2)$, il suffit d'écrire la matrice $3\times 3$

$$\Lambda_2 = \begin{pmatrix} \cosh\eta & -\sinh\eta\cos\theta & -\sinh\eta\sin\theta \\ -\sinh\eta\cos\theta & 1 + (\cosh\eta - 1)\cos^2\theta & (\cosh\eta - 1)\sin\theta\cos\theta \\ -\sinh\eta\sin\theta & (\cosh\eta - 1)\sin\theta\cos\theta & 1 + (\cosh\eta - 1)\sin^2\theta \end{pmatrix}$$

On vérifie que $\Lambda_2$ est symétrique, $\Lambda_2 = \Lambda_2^T$, comme il se doit pour un boost.

**2.** Soit $e^{(0)}$ le vecteur $(1, 0, 0, 0)$. Son transformé par $\Lambda$ est $e'^{(0)} = (\Lambda^0{}_0, \Lambda^1{}_0, \Lambda^2{}_0)$. D'après le résultat de la question **1**, le boost $S$ est donné par

$$S = \begin{pmatrix} \cosh\zeta & -\sinh\zeta\cos\psi & -\sinh\zeta\sin\psi \\ -\sinh\zeta\cos\psi & 1 + (\cosh\zeta - 1)\cos^2\psi & (\cosh\zeta - 1)\sin\psi\cos\psi \\ -\sinh\zeta\sin\psi & (\cosh\zeta - 1)\sin\psi\cos\psi & 1 + (\cosh\zeta - 1)\sin^2\psi \end{pmatrix}$$

Comme $Re^{(0)} = e^{(0)}$, $Se^{(0)} = \Lambda e^{(0)}$ et par conséquent,

$$\cosh\zeta = \Lambda^0{}_0, \qquad -\sinh\zeta\cos\psi = \Lambda^1{}_0, \qquad -\sinh\zeta\sin\psi = \Lambda^2{}_0$$

d'où

$$\cos\psi = -\frac{\Lambda^1{}_0}{\sinh\zeta} \qquad \sin\psi = -\frac{\Lambda^2{}_0}{\sinh\zeta}$$

On en déduit ${S^1}_1$ et ${S^2}_1$

$$\begin{aligned} {S^1}_1 &= 1 + (\cosh\zeta - 1)\frac{({\Lambda^1}_0)^2}{\sinh^2\zeta} = 1 + \frac{({\Lambda^1}_0)^2}{1+\cosh\zeta} \\ {S^2}_1 &= (\cosh\zeta - 1)\frac{{\Lambda^1}_0{\Lambda^2}_0}{\sinh^2\zeta} = \frac{{\Lambda^1}_0{\Lambda^2}_0}{1+\cosh\zeta} \end{aligned}$$

**3.** Le quadrivecteur transformé de $e^{(1)} = (0, 1, 0)$ a pour composantes

$$\Lambda e^{(1)} = ({\Lambda^0}_1, {\Lambda^1}_1, {\Lambda^2}_1)$$

tandis que

$$S e^{(1)} = ({S^0}_1, {S^1}_1, {S^2}_1)$$

Comme $S^{-1}\Lambda = R$, le vecteur $R\, e^{(1)}$ fait un angle $\phi_{\rm TW}$ avec l'axe $O\hat{x}^1$

$$\cos\phi_{\rm TW} = -[S^{-1}\Lambda]\, e^{(1)} \cdot e^{(1)} = -[\Lambda]\, e^{(1)} \cdot [S]\, e^{(1)}$$

(ne pas oublier le signe $-$ de la métrique de Minkowski !), ce qui donne

$$\begin{aligned} \cos\phi_{\rm TW} &= -{\Lambda^0}_1{S^0}_1 + {\Lambda^1}_1{S^1}_1 + {\Lambda^2}_1{S^2}_1 \\ &= -{\Lambda^0}_1{\Lambda^1}_0 + {\Lambda^1}_1\left(1 + \frac{({\Lambda^1}_0)^2}{1+\cosh\zeta}\right) + {\Lambda^2}_1\,\frac{{\Lambda^1}_0{\Lambda^2}_0}{1+\cosh\zeta} \\ &= {\Lambda^1}_1\frac{{\Lambda^1}_0{\Lambda^2}_0}{1+{\Lambda^0}_0} \end{aligned}$$

où nous avons utilisé (19.14) pour passer de la seconde à la troisième ligne.

**4.** Effectuons le produit $\Lambda_2\Lambda_1$, où nous rappelons que $\Lambda_1$ est un boost de rapidité $\chi$ le long de $\hat{x}^1$

$$\Lambda_1 = \begin{pmatrix} c_1 & -s_1 & 0 \\ -s_1 & c_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

tandis que

$$\Lambda_2 = \begin{pmatrix} c_2 & -s_2\cos\theta & -s_2\sin\theta \\ -s_2\cos\theta & 1+(c_2-1)\cos^2\theta & (c_2-1)\sin\theta\cos\theta \\ -s_2\sin\theta & (c_2-1)\sin\theta\cos\theta & 1+(c_2-1)\sin^2\theta \end{pmatrix}$$

La multiplication des deux matrices donne

$$\begin{aligned} {\Lambda^0}_0 &= \cosh\zeta = c_1c_2 + s_1s_2\cos\theta \\ {\Lambda^1}_0 &= -c_1s_2\cos\theta - s_1[1+(c_2-1)\cos^2\theta] \\ {\Lambda^0}_1 &= -s_1c_2 - c_1s_2\cos\theta \\ {\Lambda^1}_1 &= s_1s_2\cos\theta + c_1[1+(c_2-1)\cos^2\theta] \end{aligned}$$

Le produit $\Lambda^1{}_0\Lambda^0{}_1$ s'en déduit

$$\begin{aligned}\Lambda^1{}_0\Lambda^0{}_1 &= s_1^2 c_2 \sin^2\theta + s_1 s_2 c_1 c_2 \cos\theta(1+\cos^2\theta)\\ &\quad +(s_1^2c_2^2 + c_1^2 s_2^2)\cos^2\theta + s_1 s_2 c_1 \sin^2\theta\cos^2\theta\end{aligned}$$

Il en découle

$$\begin{aligned}(1+\Lambda^0{}_0)\Lambda^1{}_1 - \Lambda^0{}_1\Lambda^1{}_0 &= (1 + c_1c_2 + s_1s_2\cos\theta) - (c_1-1)(c_2-1)\sin^2\theta\\ &= (1+\cosh\zeta) - (c_1-1)(c_2-1)\sin^2\theta\end{aligned}$$

On en déduit le cosinus de l'angle de rotation de Thomas-Wigner

$$\cos\phi_{\mathrm{TW}} = 1 - \frac{(c_1-1)(c_2-1)}{1+\cosh\zeta}\sin^2\theta$$

Le calcul de $\sin\phi_{\mathrm{TW}}$ suit un schéma analogue.

**5.** La variation de vitesse $\delta\vec{v}$ est donnée par

$$\delta\vec{v} = \hat{n}\tanh(\chi+\varepsilon) - \hat{x}^1\tanh\chi$$

soit en termes de composantes

$$\delta v^1 \simeq \frac{\varepsilon}{\cosh^2\chi} \qquad\qquad \delta v^2 \simeq \theta\tanh\chi$$

La matrice représentative de $\Lambda_1(-\chi)$ est

$$\Lambda_1(-\chi) = \begin{pmatrix} c & s & 0\\ s & c & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

et celle de $\Lambda_2(\chi+\varepsilon,\hat{n})$

$$\Lambda_2(\chi+\varepsilon,\hat{n}) = \begin{pmatrix} c+\varepsilon s & -s-\varepsilon c & -s\theta\\ -s-\varepsilon c & c+\varepsilon s & (c-1)\theta\\ -s\theta & (c-1)\theta & 1\end{pmatrix}$$

La multiplication des deux matrices donne

$$\Lambda_2\Lambda_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & -s\theta\\ -\varepsilon & 1 & (c-1)\theta\\ -s\theta & -(c-1)\theta & 1\end{pmatrix}$$

ce qui s'exprime en fonction des générateurs infinitésimaux (19.53)

$$\Lambda_2\Lambda_1^{-1} = I - \varepsilon(\mathrm{i}I^{01}) - s\theta(\mathrm{i}I^{02}) + (c-1)\theta(\mathrm{i}I^{31})$$

où $\mathrm{i}I^{01}$ et $\mathrm{i}I^{02}$ sont les générateurs infinitésimaux des boosts suivant $\hat{x}^1$ et $\hat{x}^2$ et $\mathrm{i}I^{31}$ celui des rotations autour de $\hat{x}^3$.

**6.** L'accélération de l'électron sur son orbite est

$$\vec{a} = \frac{q}{m}\,\vec{E} = \frac{1}{m}\left[-\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right]\vec{r}$$

où $V$ est l'énergie potentielle, et par conséquent,

$$\vec{\omega} = \frac{1}{2m}\left[-\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right]\vec{r}\times\vec{v} = -\frac{1}{2m^2}\left[\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right]\vec{l}$$

où $\vec{l}$ est le moment angulaire. Par ailleurs, l'équation du mouvement du spin $\vec{s}$ dans le référentiel propre est

$$\left.\frac{\mathrm{d}\vec{s}}{\mathrm{d}t}\right|_{\text{ref. propre}} = \vec{\mu}\times\vec{B} = \frac{q}{m}\,\vec{s}\times\vec{B}$$

où $\vec{\mu} = (q/m)\vec{s}$ est le moment magnétique. Ceci correspond à une énergie magnétique

$$U = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\frac{q}{m}\,\vec{s}\cdot\vec{B} = \frac{1}{m^2}\left[\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right](\vec{l}\cdot\vec{s})$$

L'équation du mouvement du spin dans le référentiel du laboratoire est

$$\frac{\mathrm{d}\vec{s}}{\mathrm{d}t} = \vec{s}\times\left[\frac{q}{m}\,\vec{B} - \vec{\omega}\right]$$

correspondant à une énergie additionnelle

$$\Delta U = \vec{s}\cdot\vec{\omega} = -\frac{1}{2m^2}\left[\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right](\vec{l}\cdot\vec{s})$$

La somme $U + \Delta U$ donne le hamiltonien spin-orbite (15.20)

$$W_{\text{so}} = \frac{1}{2m^2}\left[\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right](\vec{l}\cdot\vec{s})$$

### 19.6.9 Courant de Dirac en présence d'un champ magnétique

Exprimant le spineur de Dirac en fonction des deux composantes $\Psi$ et $\Phi$ dans la base de Dirac

$$\psi = \begin{pmatrix}\Psi\\ \Phi\end{pmatrix}$$

on obtient pour les composantes d'espace du courant

$$j^i = (\Psi^\dagger, \Phi^\dagger)\gamma^0\gamma^i\begin{pmatrix}\Psi\\ \Phi\end{pmatrix}$$

On utilise alors la relation approchée valable pour des particules de faible vitesse

$$\Phi = \frac{1}{2m}\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{P})\Psi$$

d'où

$$j^i = \frac{1}{2m}\left[\Psi^\dagger\sigma_i\sigma_k(P^k\Psi) + (P^k\Psi)^\dagger\sigma_k\sigma_i\Psi\right]$$

On utilise ensuite

$$\sigma_i\sigma_k = \delta_{ik} + \mathrm{i}\varepsilon_{ikl}\sigma_l$$

Le second terme de cette égalité donne une contribution à $j^i$ (avec $P^k = -\mathrm{i}\partial_k$)

$$J^i = \frac{1}{2m}\varepsilon_{ikl}\partial_k(\Psi^\dagger\sigma_l\psi) = \frac{1}{2m}\left[\vec{\nabla}\times(\Psi^\dagger\vec{\sigma}\Psi)\right]^i$$

## 19.6.10 Transformation de Lorentz d'un spineur de Dirac

**1.** La relation $x^\nu = (\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu x'^\mu$ montre que $\partial x^\nu/\partial x'^\mu = (\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu$. Compte tenu de $\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x)$, on doit avoir

$$\mathrm{i}\gamma^\mu\partial'_\mu S(\Lambda)\psi(x) - mS(\Lambda)\psi(x) = 0$$

soit

$$\mathrm{i}\gamma^\mu(\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu\partial_\nu(S(\Lambda)\psi(x)) - mS(\Lambda)\psi(x) = 0$$

Multiplions cette équation par $S^{-1}(\Lambda)$

$$\mathrm{i}S^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu(\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu S(\Lambda)\partial_\nu\psi(x) - m\psi(x) = 0$$

Pour retrouver l'équation de Dirac à laquelle obéit $\psi(x)$, il faut que

$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu(\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu S(\Lambda) = \gamma^\nu$$

et en multipliant par $\Lambda^\tau{}_\nu$

$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^\tau S(\Lambda) = \Lambda^\tau{}_\nu\gamma^\nu$$

**2.** Choisissant $\Lambda$ voisine de l'identité, l'équation ci-dessus implique

$$\begin{aligned}\frac{-\mathrm{i}}{4}\,\omega_{\alpha\beta}[\sigma_{\alpha\beta},\gamma^\mu] &= \varpi^\mu{}_\nu\gamma^\nu = \omega_{\alpha\beta}g^{\mu\alpha}\gamma^\beta \\ &= \frac{1}{2}\,\omega_{\alpha\beta}[g^{\mu\alpha}\gamma^\beta - g^{\mu\beta}\gamma^\alpha]\end{aligned}$$

où nous avons antisymétrisé le membre de droite afin de pouvoir identifier les coefficients de $\omega_{\alpha\beta}$. L'identification donne alors

$$[\sigma^{\alpha\beta},\gamma^\mu] = 2\mathrm{i}[g^{\mu\alpha}\gamma^\beta - g^{\mu\beta}\gamma^\alpha]$$

Pour vérifier que

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{\mathrm{i}}{2}\,[\gamma^\alpha, \gamma^\beta]$$

obéit bien à cette relation de commutation, il faut calculer le commutateur $[[\gamma^\alpha, \gamma^\beta], \gamma^\mu]$. Le calcul s'effectue aisément en utilisant

$$\begin{aligned}\gamma^\mu\gamma^\alpha\gamma^\beta &= 2g^{\mu\alpha}\gamma^\beta - \gamma^\alpha\gamma^\mu\gamma^\beta \\ &= 2g^{\mu\alpha}\gamma^\beta - 2g^{\mu\beta}\gamma^\alpha + \gamma^\alpha\gamma^\beta\gamma^\mu\end{aligned}$$

# C Constantes physiques

| | | |
|---|---|---|
| vitesse de la lumière dans le vide | : | $c = 3.00\,\mathrm{m.s^{-}1}$ |
| constante de Planck | : | $h = 6.63 \times\ 10^{-34}\mathrm{J.s}$ |
| constante de Planck divisée par $2\pi$ | : | $\hbar = 1.055 \times\ 10^{-34}\mathrm{J.s}$ |
| charge de l'électron ($q_e < 0$) | : | $\lvert q_e\rvert = 1.602 \times\ 10^{-19}\ \mathrm{Cb}$ |
| masse de l'électron | : | $m_e = 9.11 \times\ 10^{-31}\ \mathrm{kg} = 0.511\,\mathrm{MeV.c^{-2}}$ |
| masse du proton | : | $m_p = 1.673 \times\ 10^{-27}\ \mathrm{kg} = 938.3\,\mathrm{MeV.c^{-2}}$ |
| masse du neutron | : | $m_n = 1.675 \times\ 10^{-27}\ \mathrm{kg} = 939.5\,\mathrm{MeV.c^{-2}}$ |
| constante de Rydberg | : | $R_\infty = \frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 = 13.61\,\mathrm{eV}$ |
| magnéton de Bohr | : | $\mu_\mathrm{B} = \frac{\lvert q_e\rvert\hbar}{2m_e} = 5.79 \times 10^{-5}\ \mathrm{eV.T^{-1}}$ |
| magnéton de Bohr nucléaire | : | $\mu_N = \frac{\lvert q_e\rvert\hbar}{2m_p} = 3.15 \times 10^{-8}\ \mathrm{eV.T^{-1}}$ |
| constante de Boltzmann | : | $k_\mathrm{B} = 1.38 \times 10^{-23}\ \mathrm{J.K^{-1}}$ |
| constante de gravitation | : | $G = 6.67 \times 10^{-11}\ \mathrm{N.m^2.kg^{-2}}$ |
| conversion énergie-longueur d'onde | : | $E = 1\,\mathrm{eV} \leftrightarrow \lambda = 1.24\,\mu\mathrm{m}$ |
| conversion énergie-fréquence | : | $E = 1\,\mathrm{eV} \leftrightarrow \nu = 2.42 \times 10^{14}\ \mathrm{Hz}$ |
| conversion énergie-température | : | $E = 1\,\mathrm{eV} \leftrightarrow T = 11600\,\mathrm{K}$ |

# Références


1. Abers [2004] : E. Abers, *Quantum mechanics*, Pearson Education, New Jersey.
2. Abramowitz et Stegun [1964] : M. Abramowitz and I. Stegun eds., *Handbook of mathematical functions*, Dover, New-York.
3. Ahmad *et al.* [2001] : Q. Ahmad *et al.*, (SNO Collaboration), Interactions produced by $B^8$ solar neutrinos at the Sudbury Neutrino Observatory, *Phys.Rev. Lett.* **87**, 071301.
4. Akitt [1992] : J.W. Akitt, *NMR chemistry, an introduction to modern NMR spectroscopy*, Chapman&Hall, New-York.
5. Anandan [1992] : J. Anandan, The geometric phase, *Nature* **360**, 307.
6. Arndt *et al.* [1999] : M. Arndt, O. Nairz, J. Vos-Andreae, C. Keller, G. van der Zouw and A. Zeilinger, Wave-particle duality of $C_{60}$ molecules, *Nature* **401**, 680 (1999).
7. Arndt *et al.* [2005] : M. Arndt, K. Hornberger and A. Zeilinger, Probing the limits of the quantum world, *Physics World* **18**, March 2005, pp. 35–40.
8. Aspect [1999] : A. Aspect, Bell's inequalities : more ideal than ever, *Nature* **398**, 189-190.
9. Aspect *et al.* [1982] : A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger, Experimental realization of Einstein-Podolsky-Rosen gedanken experiment : a new violation of Bell's inequalities, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 91 (1982) ; A. Aspect, J. Dalibard, and G. Roger, Experimental test of Bell's inequalities using time varying analyzers, *Phys. Rev. Lett.* **49** 1804 (1982).
10. Aspect *et al.* [1989] : A. Aspect, P. Grangier et G. Roger, Dualité onde-corpuscule pour un photon unique, *J. Optics (Paris)* **20**, 119.
11. Badurek *et al.* [1985] : G. Badurek, H. Rauch and D. Tuppinger, Neutron interferometric double-resonance experiment, *Phys. Rev.* **A34**, 2600-2608.
12. Balian [1991] : R. Balian, *From Microphysics to Macrophysics*, Springer, Berlin.
13. Ballentine [1990] : L. Ballentine, Limitations of the projection postulate, *Found. Phys.* **20**, 1329.
14. Ballentine [1998] : L. Ballentine, *Quantum Mechanics*, World Scientific.

15. Basdevant et Dalibard [2001] : J-L Basdevant et J. Dalibard, *Mécanique quantique*, Éditions de l'École Polytechnique, Palaiseau.
16. Baym [1969] : G. Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, Benjamin, Reading.
17. Baym [1998] : G. Baym, The physics of Hanbury Brown-Twiss intensity interferometry : from stars to nuclear collisions, *Acta Physica Polonica* **B29**, 1839.
18. Bell [1990] : J. S. Bell Against measurement, *Physics World* **33**, August, p. 33.
19. Bell [2004] : J. S. Bell *Speakable and unspeakable in quantum mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge.
20. Bennett *et al.* [1992] : C. Bennett, G. Brassard and A. Ekert, Quantum cryptography, *Scientific American* **267**, October p. 26.
21. Berry [1991] : M. Berry, Some Quantum to Classical Asymptotics, Les Houches 1989, *Chaos et Physique Quantique*, Elsevier.
22. Berry et Robbins [1997] : M. Berry and J. Robbins, Indistiguishability for quantum particles : spin, statistics and the geometric phase, *Proc. Roy. Soc. London* **A453**, 1771.
23. Bethe et Morrison [1956] : H. Bethe et Ph. Morrison, *Elementary Nuclear Theory*, John Wiley.
24. Blatt [2004] : R. Blatt, Quantum information processing in ion traps, in Les Houches Summer School 2003, *Quantum entanglement and information processing*, D. Estève, J.-M. Raimond, and M. Brune eds., Elsevier, Amsterdam, p. 223-260.
25. Bohr [1935] : N. Bohr, Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete ? *Phys. Rev.* **48**, 696.
26. Braginsky *et al.* [1980] : V. Braginsky, Y. Vorontsov and K. Thorne, Quantum non demolition measurements, *Science* **209**, 547.
27. Bransden et Joachain [1983] : B. Bransden and C. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, Longman Scientific and Technical, Harlow (1983)
28. Breitenaker et Treps [2010] : F. Breitenaker et N. Treps eds, *Le laser* EDP Sciences, Paris.
29. Breuer et Petruccione [2002] : H. Breuer and F. Petruccione, *The theory of open quantum systems*, Oxford University Press, Oxford.
30. Brown et Holland [1999] : H. Brown and P. Holland, The Galilean covariance of quantum mechanics in the case of external fields, *Am. Journ. Phys.* **67**, 204.
31. Brune *et al.* [1996a] : M. Brune, F. Schmidt-Kaler, A. Maali, J. Dreyer, E. Hagley, J-M Raimond and S. Haroche, Quantum Rabi oscillations : a direct test of field quantization, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1800.
32. Brune *et al.* [1996b] : M. Brune, E. Hagley, J. Dreyer, X. Maître, A. Maali, C. Wunderlich, J-M Raimond and S. Haroche, Observing the progressive decoherence of the "meter" in a quantum measurement, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4887 (1996).
33. Buhrman *et al.* [2010] : H. Buhrman, R. Cleve, S. Massar and R. de Wolf, Nonlocality and communication complexity, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 665.

34. Buzek et Hillery [1996] : V. Buzek and M. Hillery, Quantum copying : beyond the no-cloning theorem, *Phys. Rev.* **A54**, 1844.
35. Caldeira et Leggett [1983] : A. Caldeira and A. Leggett, Path integral approach to quantum Brownian motion, *Ann. Phys.* **149**, 374.
36. Carmichael [1993] : H. Carmichael, *An open system approach to quantum optics*, Springer-Verlag, Berlin.
37. Castin [2001] : Y. Castin, Bose-Einstein condensates in atomic gases : simple theoretical results, dans *Coherent atomic matter waves*, École d'été des Houches, R. Kaiser, C. Westbrook, and F. David eds., EDP Sciences/Springer-Verlag.
38. Caves *et al.* [1980] : C. Caves *et al.*, On the measurement of a weak classical force coupled to a quantum mechanical oscillator, *Rev. Mod. Phys.* **52**, 341.
39. Child [1991] : M. Child, *Semiclassical mechanics with molecular applications*, Clarendon Press, Oxford.
40. Clauser [1976] : J. Clauser, Experimental investigation of a polarization correlation anomaly, *Phys. Rev. Lett.* **36**, 1223.
41. Cohen-Tannoudji [1989] : C. Cohen-Tannoudji, Cohérences quantiques et dissipation, Cours au Collège de France 1988/89, disponible sur le site web www.lkb.ens.fr.
42. Cohen-Tannoudji [1990] : C. Cohen-Tannoudji, Théorie de la mesure, Cours au Collège de France 1989/90, disponible sur le site web www.lkb.ens.fr.
43. Cohen-Tannnoudji [1992] : C. Cohen-Tannnoudji, *Atomic Motion in Laser Light*, dans *Optical Coherence and Quantum Optics*, École des Houches, North Holland.
44. Cohen-Tannoudji [1999] : C. Cohen-Tannoudji, *Condensats de Bose-Einstein atomiques*, Cours au Collège de France 1998/1999, disponible sur le site web www.lkb.ens.fr.
45. Cohen-Tannoudji *et al.* [1973] : C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique quantique*, Hermann, Paris.
46. Cohen-Tannoudji *et al.* [1988] : C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et G. Grynberg, *Processus d'interaction entre photons et atomes*, InterEditions/Editions du CNRS, Paris.
47. Cohen-Tannoudji *et al.* [2005] : C. Cohen-Tannoudji, J. Dalibard et F. Laloë, La condensation de Bose-Einstein dans les gaz, dans *Einstein aujourd'hui*, p. 87, M. Le Bellac et M. Leduc eds., EDP Sciences/Éditions du CNRS, Paris.
48. Colella *et al.* [1975] : R. Colella, A. Overhauser and S. Werner, Observation of gravitationally induced quantum interference, *Phys. Rev. Lett.* **34**, 1472.
49. Comtet *et al.* [1992] : A. Comtet, J. Mc Cabe et S. Ouvry, Vers de nouvelles statistique quantiques, *Images de la Physique*, CNRS, p. 21.
50. Conway et Kochen [2009] ; J. Conway and S. Kochen, The strong free will theorem, *Notices of the AMS* **56**, 226.
51. Dalibard [2003] : J. Dalibard, *Cohérence quantique et dissipation*, disponible sur le site web www.lkb.ens.fr.
52. Darrigol [2005] : O. Darrigol, 1905 : un nouvel élan, dans *Einstein aujourd'hui*, p. 1, M. Le Bellac et M. Leduc eds., EDP Sciences/Éditions du CNRS, Paris.

53. Diu *et al.*[1990] : B. Diu, C. Guthman, D. Lederer et B. Roulet, *Physique statistique*, Hermann, Paris.
54. Donoghue *et al.* [1992] : J. Donoghue, E. Golowich and B. Holstein, *Dynamics of the standard model*, Cambridge University Press, Cambridge.
55. Dürr *et al.* [1998] : S. Dürr, T. Nonn, and G. Rempe, Origin of quantum-mechanical complementarity probed by a 'which way' experiment in an atom interferometer, *Nature* **395**, 33–37.
56. Eguchi *et al.* [2003] : K. Eguchi *et al.* (Kamland Collaboration), First results from Kamland : evidence for reactor neutrino disappearance, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 021802.
57. Einstein *et al.* [1935] : A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete ?, *Phys. Rev.* **47**, 777–780.
58. Englert *et al.* [1991] : B. Englert, M. Scully and H. Walther, Quantum optical tests of complementarity, *Nature* **351**, 111.
59. Englert *et al.* [1995] : B. Englert, M. Scully and H. Walther, La dualité de la lumière et de la matière, *Pour la Science* **208**, 60.
60. d'Espagnat [1995] : B. d'Espagnat, *Le réel voilé*, Fayard, Paris.
61. Feynman *et al.* [1965] : R. Feynman, R. Leighton and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Addison-Wesley, Reading.
62. Fine [1982] : A. Fine, Hidden variables, joint probability and the Bell inequalities, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 291.
63. Foerster [1975] : D. Foerster, *Hydrodynamics fluctuations, broken symmetry and correlation functions*, Benjamin, New York.
64. Freedman et Clauser [1972] : S. Freedman and J. Clauser, Experimental test of local hidden variable theories, *Phys. Rev. Lett.*, **28**, 938.
65. Fukuda *et al.* [2001] : S. Fukuda *et al.* (SuperKamiokande Collaboration), Solar $B^8$ and high energy physics neutrino measurements from 1258 days of SuperKamiokande data, *Phys.Rev. Lett.* **86**, 5651.
66. Gasiorowicz [1966] : S. Gasiorowicz, *Elementary Particle Physics*, J. Wiley, New-York.
67. Gatz [1971] : C. Gatz, *Introduction to Quantum Chemistry*, C.E. Merrill, Columbia.
68. Gerry et Knight [2005] : C. Gerry and P. Knight, *Introductory Quantum Optics*, Cambridge University Press.
69. Ginsberg *et al.* [2007] : N. Ginsberg, S. Garner and L. Hau, Coherent control of optical information with matter wave dynamics, *Nature* **445**, 623.
70. Gisin [2012] : N. Gisin, *L'impensable hasard*, Odile Jacob, Paris.
71. Gisin *et al.* [2002] : N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel and H. Zbinden, Quantum cryptography, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 145–195.
72. Gleyzes *et al.* [2007] : S. Gleyzes *et al.*, Quantum jumps of light recording the birth and death of a photon in a cavity, *Nature* **446**, 297.
73. Goodrich [1972] : F. Goodrich, *A Primer of Quantum Chemistry*, Wiley, New-York.

74. Gottfried et Yan [2033] ; K. Gottfried and T. Yan, *Quantum mechanics : fundamentals*, Springer, Berlin.
75. Gourgoulhon [2010] : E. Gourgoulhon, *Relativité restreinte*, EDP Sciences/CNRS Editions, Paris.
76. Grangier [2002] : Ph. Grangier, Single photons stick together, *Nature* **419**, 577.
77. Grynberg *et al.* [2010] : G. Grynberg, A. Aspect and C. Fabre, *Introduction to quantum optics*, Cambridge University Press, Cambridge.
78. Guerlin *et al.* [2007] : C. Guerlin *et al.*, Progressive field-state collapse and quantum non-demolition photon counting, *Nature* **448**, 889.
79. Gutzwiller [1990] : M. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Systems*, Springer, Berlin.
80. Haroche et Raimond [2006] : S. Haroche and J.-M. Raimond, *Exploring the quantum*, Oxford University Press, Oxford.
81. Hasegawa it et al. [2006] : Y. Hasegawa, R. Loidl, G. Badurek, M. Baron and H. Rauch, Quantum contextuality in a single-neutron optical experiment, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 230401.
82. Hecht [1987] : E. Hecht, *Optics*, Addison-Wesley, New-York.
83. Hey et Walters [2003] : T. Hey and P. Walters, *The New Quantum Universe*, Cambridge University Press, Cambridge.
84. Hillery *et al.* [1984] : M. Hillery, R. O'Connell, M. Scully and E. Wigner, Distribution functions in Physics : Fundamentals, *Phys. Reports* **106**, 121-167.
85. Holland [1993] : P. Holland, *The quantum theory of motion*, Cambridge University Press, Cambridge.
86. Hornberger *et al.* [2012] : K. Hornberger, S. Gerlich, P. Haslinger, S. Nimmrichter and M. Arndt, Quantum interference of clusters and molecules, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 157.
87. Howard [2004] : D. Howard, Who invented the Copenhagen interpretation ?, *Phil. of Science* **71**, 669.
88. Huang [1963] : K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley, New-York.
89. Isham [1995] : C. Isham, *Lectures on Quantum Theory*, Imperial College Press, Londres.
90. Itzykson et Zuber [1980] : C. Itzykson et J-B Zuber, *Quantum Field Theory*, Mac Graw Hill, New-York.
91. Jackson [2001] : J.D. Jackson, *Électrodynamique classique*, Dunod, Paris.
92. Jacques *et al.* [2005] : V. Jacques, E. Wu, F. Grosshans, F. Treussart, Ph. Grangier, A. Aspect and J-F Roch, Single photon wave-front splitting interference, *Eur. J. Phys.* **D 35**, 561.
93. Jacques *et al.* [2007] : V. Jacques, E. Wu, F. Grosshans, F. Treussart, Ph. Grangier, A. Aspect and J-F Roch, Experimental realization of Wheeler's delayed choice experiment, *Science* **315**, 966.
94. Jauch [1968] : J. Jauch, *Foundations of Quantum Mechanics*, Addison Wesley, Reading.

95. Jacob [2002] : M. Jacob, Le modèle standard de la physique des particules, *Pour la Science* **300**, p. 58, octobre.
96. Jeltes *et al.* [2007] : T. Jeltes *et al.*, Comparison of the Hanbury Brown-Twiss effect for bosons and fermions, *Nature* **445**, 402.
97. Joos et Zeh [1985] : E. Joos and H. Zeh : The emergence of classical properties through interaction with the environment, *Zeit. Phys.* **B59**, 223.
98. Kaiser *et al.* [2012] : F. Kaiser, T. Coudreau, P. Milman, D. Ostrowsky and S. Tanzilli, Entanglement enabled delayed choice experiment, *Science* **338**, 637.
99. Kiesel *et al.* [2002] : H. Kiesel, A. Renz and F. Hasselbach, Observation of Hanbury Brown and Twiss anticorrrelations for free electrons, *Nature* **418**, 392.
100. Kittel [1970] : C. Kittel, *Introduction à la physique du solide*, Dunod, Paris.
101. Kragh [2000] : H. Kragh, Max Planck : the reluctant revolutionary, *Physics World* **13**(12) December.
102. Landau et Lifschitz [1966] : L. Landau et E. Lifchitz, *Mécanique quantique*, Éditions MIR, Moscou.
103. Laloë [2011] : F. Laloë, *Comprenons-nous vraiment la mécanique quantique ?*, EDP Sciences/CNRS Éditions, Paris.
104. Le Bellac [1988] : M. Le Bellac, *Des phénomènes critiques aux champs de jauge*, Interéditions/CNRS Éditions, Paris.
105. Le Bellac [2006] : M. Le Bellac, *A short introduction to quantum information and computation*, Cambridge University Press, Cambridge.
106. Le Bellac [2010] : M. Le Bellac, *Le monde quantique*, EDP Sciences, Paris.
107. Le Bellac et Lévy-Leblond [1973] : M. Le Bellac and J.-M. Lévy-Leblond, Galilean Electromagnetism, *Nuovo Cimento* **B14**, 217.
108. Le Bellac *et al.* [2004] : M. Le Bellac, F. Mortessagne and George Batrouni *Equilibrium and Non Equilibrium Statistical Thermodynamics*, Cambridge University Press, Cambridge.
109. Lees *et al.* [2012] : J. Lees *et al.* (Babar collaboration), Observation of time-reversal violation in the $B^0$ meson system, arxiv : 1207.5832.
110. Leggett [2001] : A. Leggett, Bose-Einstein condensation in the alkali gases : some fundamental concepts, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 307.
111. Leggett [2002a] : A. Leggett, Qubits, cbits, quantum measurement and environment, in *Fundamentals of quantum information*, D. Heiss editor, Lecture notes in Physics **587**, p. 3, Springer-Verlag, Berlin.
112. Leggett [2002b] : A. Leggett, Testing the limits of quantum mechanics, *J. Phys. Cond. Mat.* **14**, R415.
113. Leggett [2005] : A. Leggett, The quantum measurement problem, *Science* **307**, 871.
114. Leggett [2006] : A. Leggett, *Quantum fluids*, Oxford University Press, Oxford.
115. Leggett [2008] : A. Leggett, Realism and the physical world, *Rep. Prog. Phys* **71**, 1.
116. Levitt [2001] : M. H. Levitt, *Spin Dynamics, Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, John Wiley, New-York.

117. Lévy-Leblond [1967] : J.-M. Lévy-Leblond, Non relativistic particles and wave equations, *Comm. Math. Phys.* **6**, 286.
118. Lévy-Leblond [1999] : J.-M. Lévy-Leblond, Mots et maux de la physique quantique, *Bull. U. Phys.* **816**, 1129.
119. Lévy-Leblond et Balibar [1984] : J-M Lévy-Leblond et F. Balibar, *Quantique : Rudiments*, InterEditions, Paris.
120. Mandel and Wolf [1995] : L. Mandel and E. Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics*, Cambridge University Press, Cambridge.
121. Matsukevitch *et al.* [2008] : D. Matsukevitch, P.Maunz, D. Moering, S. Olmscheck and C. Monroe, Bell inequality violation with two remote atomic qubits, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 150404.
122. May et Cazabat [1996] : M. May et A-M Cazabat, *Optique*, Dunod, Paris.
123. Mazoyer [2002] : B. Mazoyer, L'imagerie cérébrale : IRM et TEP, *Pour la Science* **302**, décembre, p. 42.
124. Mermin [1993] : N. Mermin, Hidden variables and the two theorems of John Bell, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 803.
125. Mermin [1998] : N. Mermin, What is Quantum Mechanics trying to teach us ?, *Am. Journ. Phys.* **66**, 753.
126. Mermin [2010] : N. Mermin, *Calculs et algorithmes quantiques : méthodes et exemples*, traduction de S. Tanzilli et O. Alibart, EDP Sciences/CNRS Editions, Paris.
127. Merzbacher [1970] : E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley, New-York.
128. Messiah [1959] : A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod, Paris.
129. Messiah et Greenberg [1964] : A. Messiah and O. Greenberg, Symmetrization postulate and its experimental verification, *Phys. Rev.* **136**, B248.
130. Mewes *et al.* [1996] : M. Mewes *et al.*, Bose-Einstein condensation in a tightly confining magnetic trap, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 416.
131. Mohiden et Roy [1998] : U. Mohiden and A. Roy, Precision measurements of the Casimir force from 0.1 to 0.9 $\mu$m, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4549.
132. Nielsen and Chuang [2001] : M. Nielsen and I. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, Cambridge.
133. Norsen [2006] : T. Norsen, Bell locality and the non-local character of nature, Found. Phys. Lett. **19**, 633.
134. Nozières et Pines [1990] : Ph. Nozières and D. Pines, *The theory of quantum liquids*. Vol II, Addidon-Wesley, New-York.
135. Olmschenk *et al.* [2009] : S. Olmschenk, D. Matsukevitch, P. Maunz, D. Hayes, L. Duan and C. Monroe, Quantum teleportation between distant matter qubits, *Science* **323**, 486.
136. Omnès [1994] : R. Omnès, *The interpretation of quantum mechanics*, Princeton University Press, Princeton.
137. Parisi [1989] : G. Parisi, *Statistical field theory*, Addison-Wesly, New-York.

138. Peres [1980] : A. Peres, Non exponential decay law, *Ann. Phys. (N.Y.)*, **129**, 33.
139. Peres [1993] : A. Peres, *Quantum Theory, Concepts and Methods*, Kluwer, Boston.
140. Perkins [2000] : D. Perkins, *An Introduction to High Energy Physics*, 4è édition, Cambridge University Press, Cambridge.
141. Pethick et Smith [2001] : C. Pethick and H. Smith *Bose-Einstein condensates of dilute gases*, Cambridge University Press, Cambridge
142. Pines et Nozières [1989] : D. Pines and Ph. Nozières, *The theory of quantum liquids.* Vol I, Addidon-Wesley, New-York.
143. Pocholle [2005] : J.-P. Pocholle, De l'émission stimulée d'Einstein aux lasers d'aujourd'hui, dans *Einstein aujourd'hui*, p. 129, M. Le Bellac et M. Leduc eds., EDP Sciences/Éditions du CNRS, Paris.
144. Popescu et Rohrlich [1987] : S. Popescu and F. Rohrlich, Quantum non locality as an axiom, *Found. Phys* **24**, 379-85.
145. Preskill [1999] : J. Preskill, Quantum computation, http://www.theory.caltech.edu/~ preskill/
146. Raimond *et al.* [1997] : J.-M. Raimond, M. Brune and S. Haroche, Reversible decoherence of a mesoscopic superposition of field states, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1964.
147. Rauch et Werner [2000] : H. Rauch and S. Werner, *Neutron Interferometry*, Clarendon Press, Oxford.
148. Rich [2002] : J. Rich, *Principes de la cosmologie*, Éditions de l'École Polytechnique, Palaiseau.
149. Rieffel et Polak [2011] : E. Rieffel and W. Polak, *Quantum computing : a gentle introduction*, MIT Press, Cambridge, Ma.
150. Riesz et Nagy [1955] : F. Riesz et B. Nagy, *Leçons d'analyse fonctionnelle*, Gauthier-Villars, Paris.
151. Rodberg et Thaler [1967] : L. Rodberg and R. Thaler, *The quantum theory of scattering*, Academic Press, New-York.
152. Santori *et al.* [2002] : C. Santori, J. Vukovic, G. Solomon and Y. Yamamoto, Indistiguishable photons from a single photon device, *Nature* **419**, 594.
153. Scarani [2003] : V. Scarani, *Initiation à la physique quantique*, Vuibert, Paris.
154. Scarani [2011] : V. Scarani, *Quantum information : primitive notions and quantum correlations*, dans *Ultracold gases and quantum information*, p. 105, Oxford University Press, Oxford.
155. Scarani *et al.* [2005] : V. Scarani, S. Iblisdir, N. Gisin and A. Acin, Quantum cloning, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1225.
156. Scheidl *et al.* [2010] : T. Scheidl *et al.*, Violation of local realism with freedom of choice, *Proc. Nat. Sci. USA* **107**, 46.
157. Schlossauer [2004] : M. Schlossauer, Decoherence, the measurement problem and interpretations of quantum mechanics, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 1267 (2004).

158. Schmid-Kaler *et al.* [2003] : F. Schmid-Kaler *et al.*, Realization of the Cirac-Zoller controlled-NOT gate, *Nature* **422**, 408.
159. Schrödinger [1952] : E. Schrödinger, *Br. J. Philos. Sc.*, **3**, 109.
160. Schulman [1981] : L. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Wiley.
161. Schwarzschild [2012] : B. Schwarzschild, Time-reversal asymmetry in particle physics has finally been clearly seen, Physics Today **65**(11), 16.
162. Shapere et Wilczek [1989] : A. Shapere and F. Wilczek eds., *Geometric phases in physics*, World Scientific.
163. Scully *et al.* [1989] : M. Scully, B. Englert and J. Schwinger, Spin coherence and Humpty-Dumpty III : the effect of observation, *Phys. Rev.* **A 40**, 1775.
164. Scully et Zubairy [1997] : M. Scully and M. Zubairy, *Quantum Optics*, Cambridge University Press, Cambridge.
165. Shimizu *et al.* [1992] : F. Shimizu, K. Shimizu et H. Takuma, Double-slit interference with ultracold metastable neon atoms, *Phys. Rev.* **A46**, R17 (1992).
166. Stöckman [1999] : H. Stöckman, *Quantum chaos*, Cambridge University Press, Cambridge.
167. Stolze et Suter [2004] : J. Stolze and D. Suter, *Quantum computing*, Wiley.
168. Streater et Wightman [1964] : R. Streater and A. Wightman, *PCT, spin and statistics and all that*, Benjamin, New-York.
169. Suter [1997] : D. Suter, *The Physics of Laser-Atom Interactions*, Cambridge University Press, Cambridge.
170. Tanzilli *et al.* [2002] : S. Tanzilli, W. Tittel, H. de Riedmatten, H. Zbinden, P. Baldi, M. de Micheli, D. Ostrowsky and N. Gisin, PPLN wave-guide for quantum communication, *Eur. Phys. Journ.* **D 18**, 155.
171. Taylor et Heinonen [2002] : Ph. Taylor and O. Heinonen, *Condensed Matter Physics* Cambridge University Press, Cambridge.
172. Taylor et Wheeler [1963] : E. Taylor and J. Wheeler, *Space-Time Physics*, W. H. Freeman, New-York.
173. Tinkham [1964] : M. Tinkham, *Group Theory and Quantum Mechanics*, Mc Graw Hill, New-York.
174. Tully [2011] : C. Tully, *Elementary particles in a nutshell*, Princeton University Press, Princeton.
175. Vandersypen *et al.* [2001] : L. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. Yannoni, M. Sherwood and I. Chuang, Experimental realization of quantum Shor's factoring algorithm using nuclear magnetic resonance, *Nature* **414**, 883.
176. Wark [2005] : D. Wark, Neutrinos : ghosts of matter, *Physics World* **18**(6), June.
177. Weihs *et al.* [1998] : G. Weihs *et al.*, Violation of Bell's inequalities under strict locality conditions, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5039.
178. Weinberg [1978] : S. Weinberg *Les trois premières minutes de l'Univers*, Éditions du Seuil, Paris (1978).
179. Weinberg [1995] : S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields*, Cambridge University Press, Cambridge.

180. Werner *et al.* [1975] : S. Werner, R. Colella, A. Overhauser and C. Eagen, Observation of the phase-shift of a neutron due to precession in a magnetic field, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1053.
181. Wichman[1974] : E. Wichman, *Physique quantique*, cours de physique de Berkeley volume 5, Armand Colin, Paris.
182. Wightman [1960] : A. Wightman *L'invariance dans la mécanique quantique relativiste* dans *Relations de dispersion et particules élémentaires* p. 159, Hermann, Paris.
183. Wigner [1970] : E. Wigner, On hidden variables and quantum mechanical probabilities, *Am. J. Phys.* **38**, 1005.
184. Wheeler et Zurek [1983] : J-A Wheeler and W. Zurek eds., *Quantum Theory and Measurement*, Princeton University Press, Princeton.
185. Wootters et Zurek [1979] : W. Wootters and W. Zurek eds., Complementarity in the double-slit experiment : quantum non separability and a quantitative statement of Bohr's principle, *Phys.Rev.* **D19**, 473.
186. Wu et Shaknow [1950] : C. Wu and I. Shaknow, The angular correlations of scattered annihilation radiation, *Phys. Rev.* **77**, 136.
187. Zee [2010] : A. Zee, *Quantum field theory in a nutshell*, Princeton University Press, Princeton.
188. Zeh [1970] : H. Zeh, On the interpretation of measurement in quantum theory, *Found. Phys.* **1**, 69.
189. Zeilinger [1981] : A. Zeilinger, General properties of lossless beam splitters in interferometry, *Am. J. Phys.* **49**, 882.
190. Zeilinger [1999] : A. Zeilinger, Experiments and the foundations of quantum physics, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S288.
191. Zeilinger [2000] : A. Zeilinger, La téléportation quantique, *Pour la Science* **272**, 36.
192. Zeilinger [2010] : A. Zeilinger, *Dance of the photons*, Farrar, Strauss and Giroux, New-York.
193. Zeilinger *et al.* [1988] : A. Zeilinger, R. Gähler, C. Shull, W. Treimer and W. Mampe, Single and double-slit diffraction of neutrons, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1067.
194. Zinn-Justin [1989] : J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Oxford University Press, Oxford.
195. Zinn-Justin [2003] : J. Zinn-Justin, *Intégrale de chemin en mécanique quantique : introduction*, EDPSciences/CNRS Éditions.
196. Zurek [1991] : W. Zurek, Decoherence and the transition from quantum to classical, *Physics Today*, October 1991, p. 36.
197. Zurek [2003] : W. H. Zurek, Decoherence, einselection and the quantum origin of the classical, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 715.

# Index

**J**



**K**



**L**



**M**

**P**

**S**

**T**

**V**



**Z**